Neurónové siete

Peter Kovács, Marián Margeta, Jakub Pospíchal, Jozef Brandys, Barbora Klembarová

Contents

1 Dopredné modely. Otázky 1 až 7. **2**
1.1 Stručná história konekcionizmu, vlastnosti biologického neurónu, model neurónu s prahovou logikou, implementácia Booleových funkcií. Paradigmy učenia a typy úloh pre NS. . . . 2
1.2 Binárny perceptrón: pojem učenia s učiteľom, učiace pravidlo, algoritmus trénovania, deliaca nadrovina, klasifikácia vzorov, lineárna separovateľnosť, náčrt dôkazu konvergencie, definícia a príklad. . . . 3
1.3 Spojitý perceptrón: Rôzne aktivačné funkcie perceptrónu, chybová funkcia a spôsob jej minimalizácie, učiace pravidlo, algoritmus trénovania perceptrónu. Súvis s Bayesovským klasifikátorom. . . . 5
1.4 Viacvrstvové dopredné neurónové siete: architektúra a aktivačné vzorce, odvodenie metódy učenia pomocou spätného šírenia chýb (BP) pre dvojvrstvovú doprednú NS, modifikácie BP, typy úloh pre použitie doprednej NS. . . . 7
1.5 Viacvrstvová dopredná NS ako univerzálny aproximátor funkcií (formulácia teorému), trénovacia a testovacia množina, generalizácia, preučenie, skoré zastavenie učenia, selekcia modelu, validácia modelu. Hlboké učenie NS. . . . 8
1.6 Lineárne modely NS: vzťah pre riešenie systému lin. rovníc v jednovrstvovej sieti, pojem pseudoinverzie matice, autoasociatívna pamäť: lineárny obal, princíp funkcie modelu, detektor novosti. . . . 9
1.7 Lineárne modely NS: účel Grammovho-Schmidtovho ortogonalizačného procesu, GI model. Pamäť korelačnej matice ako autoasociatívna pamäť, vzťah pre výpočet váh, presluch, porovnanie s GI. . . . 10

2 Samoorganizácia a RBF sieť. Otázky 8 až 12. **11**
2.1 Samoorganizácia v NS, základné princípy, pojem učenia bez učiteľa, typy úloh použitia, Ojovo pravidlo učenia pre jeden neurón, vysvetlenie konvergencie. . . . 11
2.2 Metóda hlavných komponentov pomocou algoritmu GHA a APEX, architektúra modelu, vzťah pre adaptáciu váh, pojem vlastných vektorov a vlastných čísel, redukcia dimenzie, aplikácia na kompresiu obrazu. . . . 12
2.3 Učenie so súťažením (typu "winner-take-all"), nevýhody. Neurobiologická motivácia algoritmu SOM, laterálna interakcia a jej náhrada v SOM, sumarizácia algoritmu, voľba parametrov modelu. . . . 13
2.4 SOM: vektorová kvantizácia, topografické zobrazenie príznakov, algoritmus SOM, parametre, redukcia dimenzie, magnifikačná vlastnosť, príklad použitia. . . . 14
2.5 Hybridné modely NS, RBF model: aktivačné vzorce, bázové funkcie, príznakový priestor, problém interpolácie, trénovanie modelu, aproximačné vlastnosti RBF siete. . . . 15

3 Rekurentné a pamäťové modely. Otázky 13 až 18. **16**
3.1 NS na spracovanie sekvenčných dát: reprezentácia času, typy úloh pre rekurentné NS. Modely s časovým oknom do minulosti, výhody a nedostatky, príklad použitia. . . . 16
3.1.1 Nerekurentné modely . . . 16
3.2 Rekurentné NS: princíp trénovania pomocou algoritmu BPTT a RTRL. Príklad použitia. . . . 17
3.2.1 Back-propagation through time - BPTT . . . 17
3.2.2 Real-time recurrent learning - RTRL . . . 18
3.3 Elmanova sieť: interné reprezentácie pri symbolovej dynamike, Markovovské správanie, architekturálna predispozícia. Model rekurzívnej SOM (RecSOM). . . . 19
3.4 Sieť s echo stavmi (ESN): architektúra, inicializácia, trénovanie modelu, vplyv parametrov na vlastnosti rezervoára, echo vlastnosť, pamäťová kapacita. . . . 19
3.5 Hopfieldov model NS: deterministická dynamika, energia systému, relaxácia, typy atraktorov, autoasociatívna pamäť – nastavenie váh, princíp výpočtu kapacity pamäte. . . . 20
3.6 Nelineárne dynamické systémy: stavový portrét, dynamika, typy atraktorov. Hopfieldov model NS: stochastická dynamika, parameter inverznej teploty, princíp odstránenia falošných atraktorov. . . . 20

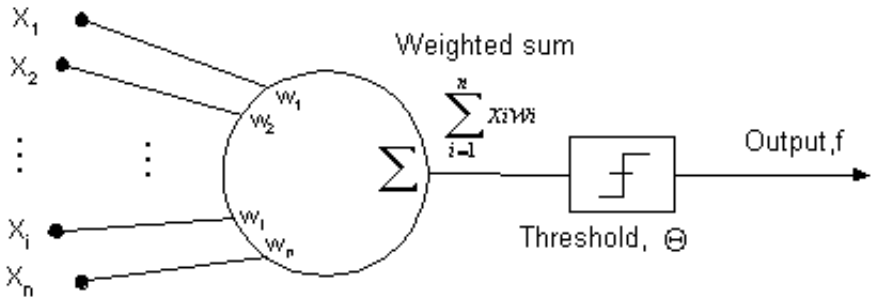
1 Dopredné modely. Otázky 1 až 7.

1.1 Stručná história konekcionizmu, vlastnosti biologického neurónu, model neurónu s prahovou logikou, implementácia Booleových funkcií. Paradigmy učenia a typy úloh pre NS.

Stručná história konekcionizmu sa začína v 40tych rokoch v psychologii a filozofii. McCullogh a Pitts vymyslia neuron s aktivacnym prahom. Neskor v 60. až 70. rokoch sa k ich nápadu vyjadrý Minsky, zrozumitelnejšie to popíše a dá to do kontextu s teóriou formálnych jazykov a automatov. V 90. rokoch prichádzajú na výslnie viacvrstvové generatívne modely a od roku 2000 prichádza druhá renesancia - deep learning, rekurentné a konvolučné neurónové sieťe a tiež siete s echo stavmi.

Nervová bunka sa skladá z tela a niekoľkých výbežkov. Tieto možno rozdeliť na dva typy: dendrity, ktoré predstavujú z informatického hľadiska vstupnú časť (predovšetkým na ne prechádza vzruch z iných buniek) a jeden axón, po ktorom sa vzruch šíri k iným bunkám.[Uvod do teórie neurónových sietí.]

Neurón s prahovou logikou vyzerá nasledovne,



$$f = 1 \text{ if } \sum_{i=1}^{n} x_i w_i \geq \Theta$$
$$= 0, \text{ otherwise}$$

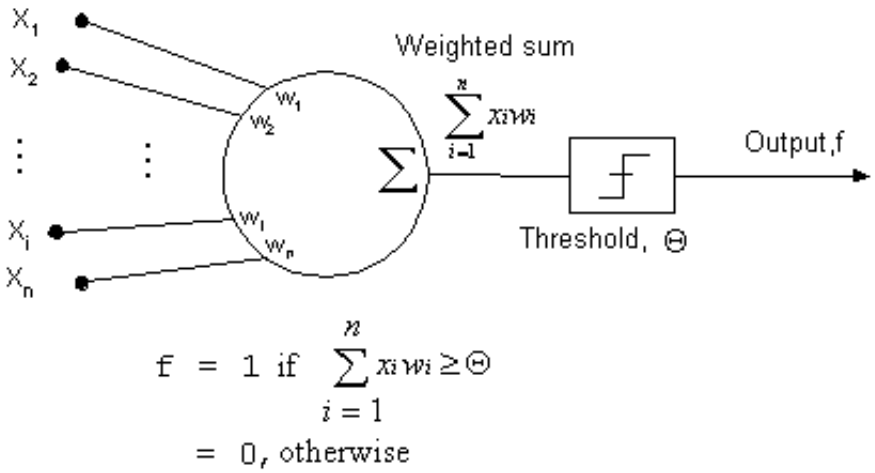
v prípade, že by sme pomocou neho chceli implementovať booleovské funkcie, napríklad logický AND jednoducho pre každú premennú použijeme jeden vstup a threshold bude rovný počtu premenných. V prípade OR by stačilo aby threshold bol 1. Ešte by bolo vhodné podotknúť, že každá booleovská funkcia môže byť simulovaná pomocou dvojvrstvovej NN s logickými jednotkami.

Medzi paradigmy učenia v neurónových sietiach patrí určite učenie s učiteľom a učenie bez učiteľa. Ako príklad si uveďme cenu domov v Bratislave. Vstupom sú dáta typu rozloha/cena/počet izieb a výstupom cena. V prípade učenia s učiteľom máme dostupnú cenu ktorú chceme predikovať. V prípade učenia bez učiteľa máme k dispozícii iba prvé tri vstupy a na základe nich môžeme byty zhlukovať do kategórií veľký/malý etc. Poslednou paradigmou učenia je učenie posilnovaním, ktoré funguje na základe nejakej funkcie odmeny. Po každej akcii sa posunieme do nového stavu a prostredie nám poskytne informáciu či to čo sme spravili je správne alebo nie.

V dnešnej dobe sa neurónové siete používajú na kadečo významné úspechy dosiahli v oblasti spracovania obrazu(konvolučné siete), spracovaní prirodzeného jazyka, zvuku alebo iných sekvenčných dát(rekurentné)...

1.2 Binárny perceptrón: pojem učenia s učiteľom, učiace pravidlo, algoritmus trénovania, deliaca nadrovina, klasifikácia vzorov, lineárna separovateľnosť, náčrt dôkazu konvergencie, definícia a príklad.

Binarny perceptron === dáva nám output 1/0 [??]



$$f = 1 \text{ if } \sum_{i=1}^{n} x_i w_i \geq \Theta$$
$$= 0, \text{ otherwise}$$

Učiace pravidlo updatuje perceptrón na základe toho aký výstup nám vypluje a aký bol požadovaný výstup.

$$w_j(t+1) = w_j + \alpha(d-y)x_j$$

kde w_j je váha j-teho vstupu α je rýchlosť učenia, d je očakývaný výstup, y je výstup perceptrónu a x_j je j-ty vstup.

Algoritmus trénovania je nasledovný:

1. Zvoľ vstup x a vypočítaj výstup y.
2. Spočítaj chybovú funkciu $e(t) = 1/2(d-y)^2$ a pripočítaj k celkovej chybe $E := E + e(t)$.
3. uprav všetky váhy na základe učiaceho pravidla (ak e(t) > 0),
4. ak som použil všetky trénovacie vstupy goto 5. inak goto 1.
5. ak $E = 0$ (setky patterny su spravne zaklasifikovane) skonči inak poprehadzuj vstup $E := 0$ a začni od 1.

To čo vlastne perceptrón spraví je, že rozdelí(klasifikuje) vstupy do dvoch tried, tie ktoré ho aktivujú a tie ktoré nie. Vo všeobecnosti perceptrón len hľadá nejakú deliacu nadrovinu, ktorú vieme zapísať v tvare $\sum_{i=1}^{n} w_i x_i = \theta$.

V roku 1962 Rosenblatt sformuloval vetu: Nech triedy A a B sú lineárne separoveteľne(existuje nadrovina, ktorá správne oddeli jednu triedu od druhej) potom perceptrón konverguje, tj. nájde deliacu nadrovinu, ktorá rozdelí tieto dáta do dvoch množín.

Dôkaz:

Vezmime si dve lineárne separovateľné triedy C_1 a C_2. Váhy predstavuje matica w. Rovnica priamky oddeľujúcej triedy je $\overrightarrow{w}^T \cdot \overrightarrow{x} = 0$.

Máme nejakú trénovaciu množinu H_1 (H_2), ktorej prvky patria do triedy C_1 (C_2).

Platí:

$$\overrightarrow{w}^T \cdot \overrightarrow{x} > 0, \qquad \overrightarrow{x} \in C_1$$
$$\overrightarrow{w}^T \cdot \overrightarrow{x} \leq 0, \qquad \overrightarrow{x} \in C_2$$

Teraz, weight update algoritmus bude fungovať:

1. Take $\overrightarrow{x}(n)$

$$\overrightarrow{w}(n+1) = \overrightarrow{w}(n), \qquad ak\ \overrightarrow{w}^T(n) \cdot \overrightarrow{x}(n) > 0\ \wedge\ \overrightarrow{x}(n) \in C_1$$
$$\overrightarrow{w}(n+1) = \overrightarrow{w}(n), \qquad ak\ \overrightarrow{w}^T(n) \cdot \overrightarrow{x}(n) \leq 0\ \wedge\ \overrightarrow{x}(n) \in C_2$$

2.

$$\vec{w}(n+1) = \vec{w}(n) - \alpha\vec{x}(n), \qquad ak\ \vec{w}^T(n)\cdot\vec{x}(n) > 0\ \wedge\ \vec{x}(n) \in C_2$$
$$\vec{w}(n+1) = \vec{w}(n) + \alpha\vec{x}(n), \qquad ak\ \vec{w}^T(n)\cdot\vec{x}(n) \leq 0\ \wedge\ \vec{x}(n) \in C_1$$

Proof:
Assumptions:

- Lineárna separovateľnosť
- $\vec{w}(0) = \vec{0}$
- $\alpha = 1$

Vezmime si $\vec{x}(n)$ pre $n = 1, 2, 3\ldots$ tak, že $\vec{x}(n) \in H_1$ a zároveň všetky odpredikujeme zle. Teda platí:

$$\vec{w}(n+1) = \vec{w}(n) + \vec{x}(n)$$
$$\vec{w}(n+1) = \vec{x}(1) + \vec{x}(2) + \ldots + \vec{x}(n) \tag{1.1}$$

Z toho že C_1 a C_2 sú lineárne separovateľné vyplýva, že existuje riešenie w_0, pre ktoré platí:

$$\vec{w}_0^T \cdot \vec{x}(n) > 0, \qquad for\ \vec{x}(1), \vec{x}(2), \ldots \vec{x}(n) \in H_1$$

Z toho si vyvodíme a:

$$a = \min_{\vec{x}(n)\in H_1} \vec{w}_0^T \cdot \vec{x}(n)$$

Prenásobme rovnicu 1.1 zľava $\vec{w}_0^T$:

$$\vec{w}_0^T\vec{w}(n+1) = \vec{w}_0^T \cdot \vec{x}(1) + \ldots \vec{w}_0^T \cdot \vec{x}(n)$$
$$\vec{w}_0^T\vec{w}(n+1) \geq n \cdot a \tag{1.2}$$

Napíšme si teraz Cauchy–Schwarzovu nerovnosť:

$$\|\vec{w}_0\|^2\|\vec{w}(n+1)\|^2 \geq [\vec{w}_0^T\vec{w}(n+1)]^2$$

Použitím 1.2 dostávame:

$$\|\vec{w}_0\|^2\|\vec{w}(n+1)\|^2 \geq n^2a^2$$

Následne upravíme na:

$$\|\vec{w}(n+1)\|^2 \geq \frac{n^2a^2}{\|\vec{w}_0\|^2} \tag{1.3}$$

Vďaka 1.3 máme dolné ohraničenie, ale ešte potrebujeme horné, vezmime si teda alternatívny prístup:

$$\vec{w}(k+1) = \vec{w}(k) + \vec{x}(k), \qquad for\ k = 1, 2, \ldots n\ \wedge\ \vec{x}(k) \in H_1$$

Squared euclidean norm of:

$$\|\vec{w}(k+1)\|^2 = \|\vec{w}(k)\|^2 + \|\vec{x}(k)\|^2 + 2\vec{w}^T(k)\cdot\vec{x}(k)$$

Perceptron je zle natrénovaný pred $k = 1, 2, \ldots n$ a keďže prvky sú z H_1, tak platí $\vec{w}^T(k)\cdot\vec{x}(k) < 0$. Potom:

$$\|\vec{w}(k+1)\|^2 \leq \|\vec{w}(k)\|^2 + \|\vec{x}(k)\|^2$$
$$\|\vec{w}(k+1)\|^2 - \|\vec{w}(k)\|^2 \leq \|\vec{x}(k)\|^2$$

Teda:

$$\|\vec{w}(n+1)\|^2 \leq \sum_{k=1}^{n} \|\vec{x}(k)\|^2$$

Vyjadríme si b:

$$b = \max_{\vec{x}(k)\in H_1} \|\vec{x}(k)\|^2$$

Potom platí:

$$\|\overrightarrow{w}(n+1)\|^2 \leq nb \tag{1.4}$$

Z rovnice 1.4 máme horné ohraničenie.

Teraz už len definujeme n_{max}, kedy aj pre rovnice 1.3 aj 1.4 nastáva rovnosť.

$$\frac{n_{max}^2 a^2}{\|\overrightarrow{w}_0\|^2} = n_{max} b$$

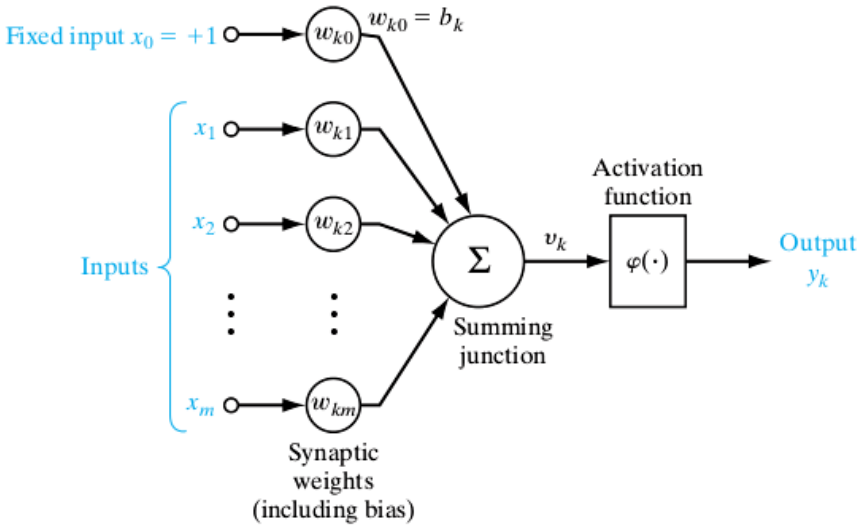
$$n_{max} = \frac{b \cdot \|\overrightarrow{w}_0\|^2}{a^2}$$

Juchú. □

Pre lepšie pochopenie odporúčam video na youtube, napr.: https://www.youtube.com/watch?v=-j8wi1OLO4Y.

1.3 Spojitý perceptrón: Rôzne aktivačné funkcie perceptrónu, chybová funkcia a spôsob jej minimalizácie, učiace pravidlo, algoritmus trénovania perceptrónu. Súvis s Bayesovským klasifikátorom.

Na rozdiel od prahového perceptrónu už nebudeme mať aktivačnú funkciu signum ale použijeme rôzne spojité funkcie napríklad sigmoidu alebo tangens hyperbolický. Sigmoida $\frac{1}{1+e^{-x}}$ nám dáva výstupy v intervale $[0,1]$ a tanh $[-1,1]$.



Ako chybovú funkciu si opäť môžeme zvoliť $1/2 \sum_p (d^{(p)} - y^{(p)})^2$ kde $d^{(p)}$ je p-ty očakávaný výstup. Aby naše výsledky boli čo najpresnejšie chceme chybovú funkciu minimalizovať. Na to používame algoritmus gradient descent, ktorý funguje tak, že nájdeme deriváciu chybovej funkcie a v smere proti gradientu budeme meniť váhy tak, aby sme sa dostali na gradient rovný 0. Keď použijeme algoritmus najstrmšieho spádu uvažujú sa dve varianty:

1. Stochastic gradient descent - po každom videnom príklade spravím update parametrov - $w_j(t+1) = w_j(t) + \alpha(d^{(p)} - y^{(p)}) f' x_j = w_j(t) + \alpha \delta x_j$.
2. Batch gradient descent - prejdeme cez všetky trénovacie príklady spočítame chyby a až potom spravíme update $w_j(t+1) = w_j(t) + \alpha \sum_p \delta x_j$.

Pri stochastickej verzii sice skonvergujeme ale nemusíme sa dostať až do úplného minima ale budeme niekde okolo neho poskakovať. Pri batch verzii robíme najstrmší krok v chybovom priestore a zmenšujeme chybu ako sa len dá, no platíme za to dlším časom počítania.

Ako dalšie často používané chybové funkcie môžeme spomenúť cross-entropy chybovú funkciu

$$-\sum_p [d^{(p)} ln(y^{(p)}) + (1 - d^{(p)}) ln(1 - y^{(p)})]$$

, ktorú keď minimalizujeme dostaneme opäť rovnaké učiace pravidlo ako pri squared error. Táto funkcia nám vlastne povie s akou pravdepodbnosťou príklad patrí do triedy 1 alebo 0.

Tato chybová funkcia je vhodná pri binárnej klasifikácii. Ďalšou funkciou je softmax $y_i = \frac{exp(net_i)}{\sum_j exp(net_j)}$, ktorá je vhodná napríklad pri klasifikácii do viacerých tried. Potom nám vlastne hovorí s akou pravdepodobnosťou sample patrí do ktorej triedy.

Analógia s bayesovským klasifikátorom

Vezmime si dve triedy C_1 a C_2. Nech platí, že majú stredné hodnoty μ_1 a μ_2 a covariance matrix Ω.

Class C_1:

$$E[\overrightarrow{x}] = \overrightarrow{\mu}_1 \qquad E[(\overrightarrow{x} - \overrightarrow{\mu}_1)(\overrightarrow{x} - \overrightarrow{\mu}_1)^T] = \Omega$$

Class C_2:

$$E[\overrightarrow{x}] = \overrightarrow{\mu}_2 \qquad E[(\overrightarrow{x} - \overrightarrow{\mu}_2)(\overrightarrow{x} - \overrightarrow{\mu}_2)^T] = \Omega$$

Ω is non-singular $\Rightarrow$ exists inverse Ω^{-1}.

Máme náhodné vektory $\overrightarrow{x}$ z gausovského rozdelenia, takže vieme definovať *conditional probability density function*:

$$f_x(\overrightarrow{x}|C_i) = \frac{1}{(2\pi)^{m/2}(\det\Omega)^{1/2}} \exp\left(-\frac{1}{2}(\overrightarrow{x} - \overrightarrow{\mu}_i)^T\Omega^{-1}(\overrightarrow{x} - \overrightarrow{\mu}_i)\right)$$

, kde $i \in \{1, 2\}$, $\overrightarrow{x}$ je observation vector a m jeho dimenzionalita.

Assumptions:

- $p_1 = p_2 = \frac{1}{2}$
- misclassifications cost: $\omega_{12} = \omega_{21}$ and correct classifications cost $\omega_{11} = \omega_{22} = 0$

Bayes classifier: "If $p_1(\omega_{21} - \omega_{11})f(\overrightarrow{x}|C_1) > p_2(\omega_{12} - \omega_{22})f(\overrightarrow{x}|C_2)$ holds, assign the observation vector $\overrightarrow{x}$ to C_1. Otherwise, assign it to C_2."

Define likelihood ratio $\Lambda(\overrightarrow{x}) = f(\overrightarrow{x}|C_1)/f(\overrightarrow{x}|C_2)$ and threshold $\xi = [p_2(\omega_{12} - \omega_{22})]/[p_1(\omega_{21} - \omega_{11})]$.

Keď si do $\Lambda(\overrightarrow{x})$ dosadíme cpdf tak sa nám prvé ich časti vykrátia, a ostanú iba exponenciálne časti. Následne si chceme vyjadriť logaritmus tohto podielu, takže to skončí ako rozdiel exponentov:

$$\begin{aligned}
\log\Lambda(\overrightarrow{x}) &= -\frac{1}{2}(\overrightarrow{x} - \overrightarrow{\mu}_1)^T\Omega^{-1}(\overrightarrow{x} - \overrightarrow{\mu}_1 + \frac{1}{2}(\overrightarrow{x} - \overrightarrow{\mu}_2)^T\Omega^{-1}(\overrightarrow{x} - \overrightarrow{\mu}_2) \\
&= (\overrightarrow{\mu}_1 - \overrightarrow{\mu}_2)^T\Omega^{-1}\overrightarrow{x} + \frac{1}{2}(\overrightarrow{\mu}_2^T\Omega^{-1}\overrightarrow{\mu}_2 - \overrightarrow{\mu}_1^T\Omega^{-1}\overrightarrow{\mu}_1) \\
y &= \overrightarrow{w}^T\overrightarrow{x} + b
\end{aligned}$$

, kde sme si rôzne časti výslednej rovnice pooznačovali ako y, w a b.

Vieme že decision boundary je $\log\Lambda(\overrightarrow{x}) > \log\xi$, keďže v našom prípade je $\xi = 1$, teda $\log\xi = 0$, tak máme decision:

$$\overrightarrow{w}^T\overrightarrow{x} - b \geq 0$$

log-likelihood test: If $y > 0$, then $x \in C_1$, else C_2.

Toto sa veľmi podobá na perceptron, ale narozdiel od P vie BC riešiť aj prípady, kedy dve triedy nie sú lineárne separovateľné. Viď obrázok 1. Akokoľvek ďaleko by sme dalo μ_1 a μ_2, vždy by boli lineárne neseparovateľné.

Comparisions between BC and P:

1. Perceptron requires linear separability.

   Bayes classifier with Gaussian pdf are non-separable.

2. Perceptron convergence is non-parametric.

   Bayes classifier is parametric.

3. Perceptron convergence is adaptive, simple to implement.

   Design of BC is fixed.

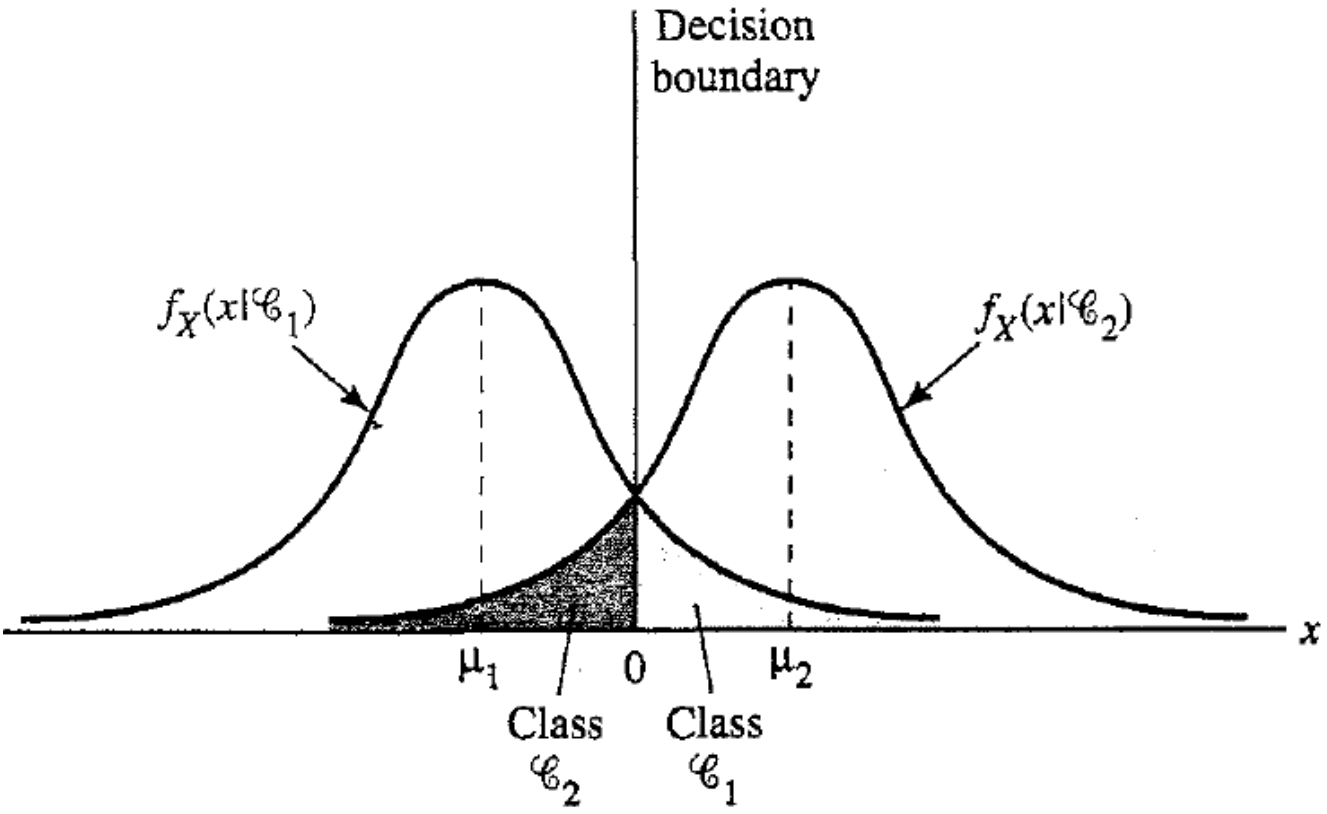


Figure 1: BC

1.4 Viacvrstvové dopredné neurónové siete: architektúra a aktivačné vzorce, odvodenie metódy učenia pomocou spätného šírenia chýb (BP) pre dvojvrstvovú doprednú NS, modifikácie BP, typy úloh pre použitie doprednej NS.

Two-layer perceptron

- Inputs $\boldsymbol{x}$, weights $\boldsymbol{w}$, $\boldsymbol{v}$, outputs $\boldsymbol{y}$
- Nonlinear activation function f
- Unit activation:

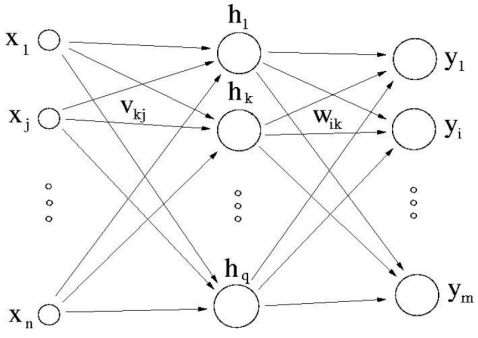
$$h_k = f\left(\sum_{j=1}^{n+1} v_{kj} x_j\right)$$

$$y_i = f\left(\sum_{k=1}^{q+1} w_{ik} h_k\right)$$

- Bias input: $x_{n+1} = h_{q+1} = -1$
- Activation function examples:

$$f(net) = 1 / (1+\exp(-net))$$

$$f(net) = \tanh(net)$$



Otázkou je ako natrénujeme takúto sieť? Ako príklad si zoberme, že chceme minimalizovať kvadratickú chybu $\frac{1}{2}\sum_i (d^{(p)} - y^{(p)})$ na vyššie uvedenom modeli.

Algoritmus error backpropagation(spatné šírenie chyby) používame na natrénovanie dopredných neurónových sietí. Algoritmus vyzerá nasledovne:

1. Vstup - trénovacia množina $\{x^{(p)}, d^{(p)}\}$
2. Inicializácia siete - náhodné váhy a nastavenie rýchlosti učenia, prípadne dalších parametrov
3. Vyber si vstup $x^{(p)}$ a spočítaj výstup $y^{(p)}$. (Forward pass)
4. Vyhodnoť chybovú funkciu $e(t)$. $E \leftarrow E + e(t)$
5. Spočítaj δ_i a δ_k (backward pass)
6. Uprav výhy podla vzťahu ktorý je nižšie.
7. Ak sme použili všetky trénovacie dáta choď na 8. inak na 3.
8. Ak je zastavovacie kritérium splnené skonči inak spermutuj trénovaciu množinu a začni znova od 1

Učiace pravidlá pre výstupnú a skrytú vrstvu sú rozdielne. Odvodiť by sme ich vedeli napríklad tak, že by sme derivovali chybovú funkciu siete. Backpropagation je v podstate to iste ako metóda najväčšieho spádu.

- Výstupná vrstva - $w_{ik}(t+1) = w_{ik}(t) + \alpha\delta_i h_k$, kde $\delta_i = (d_i - y_i)f_i'$.
- Skrytá vrstva - $v_{kj}(t+1) = v_{ik}(t) + \alpha\delta_k' x_j$, kde $\delta_k' = (\sum_i w_{ik}\delta_i)f_k'$.

Medzi aplikácie MLP môžeme zaradiť, rozpoznávanie ručne písaných PSČ, spracovanie obrazu(klasifikácia), čítanie anglického textu, etc...

1.5 Viacvrstvová dopredná NS ako univerzálny aproximátor funkcií (formulácia teorému), trénovacia a testovacia množina, generalizácia, preučenie, skoré zastavenie učenia, selekcia modelu, validácia modelu. Hlboké učenie NS.

MLP as a universal approximator

Theorem: Let's have $A_{train} = \{\boldsymbol{x}^{(1)},..., \boldsymbol{x}^{(p)},..., \boldsymbol{x}^{(N)}\}$, $\boldsymbol{x}^{(p)} \in \mathbb{R}^n$. For $\epsilon > 0$ and arbitrary continuous function F: $\mathbb{R}^n \rightarrow (0,1)$ defined on discrete set A_{train} there exists such a function G:

$$G(\boldsymbol{x}^{(p)}) = f\left(\sum_{k=1}^{q+1} w_k f\left(\sum_{j=1}^{n+1} v_{kj} x_j^{(p)}\right)\right)$$

where parameters w_k, $v_{kj} \in \mathbb{R}$ and $f(z) = \mathbb{R} \rightarrow (0,1)$ is a continuous and monotone-increasing function satisfying $f(-\infty) = 0$ and $f(\infty) = 1$, such that:

$$\Sigma_p \mid F(\boldsymbol{x}^{(p)}) - G(\boldsymbol{x}^{(p)}) \mid < \epsilon.$$

We say that G approximates F on A_{train} with accuracy ϵ.

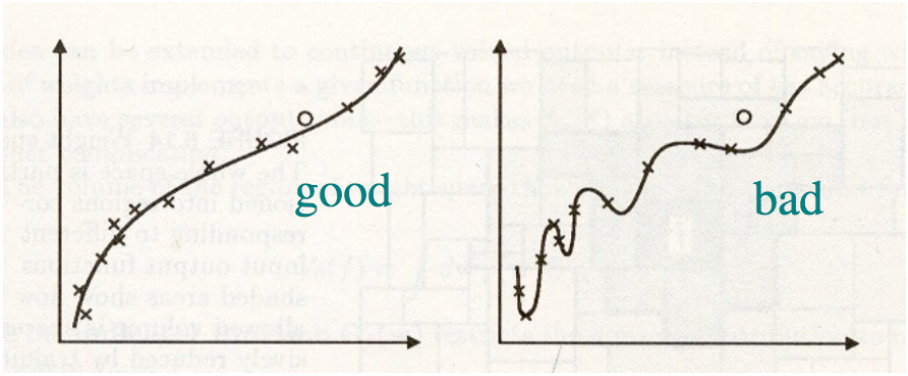
G can be interpreted as a 2-layer feedforward NN with 1 output neuron.

- it is an existence theorem
- curse of dimensionality – problem to get a dense sample for large n and complex F

Hecht-Nielsen (1987), Hornik, Stinchcombe & White (1989)

Trénovacou množinou rozumieme dáta, ktoré používame na trénovanie modelu(minimalizáciu chyby). Zvyčajne pri trénovaní modelu trénovacie dáta náhodne rozdelíme na trénovacie a validačné. Na trénovacích dátach optimalizujeme model a jeho úspešnosť vyhodnocujeme na validačných dátach. Treba si uvedomiť, že validačné a testovacie dáta nie su to isté. Validačné používame na odhad generalizácie modelu a testovacie používame až úplne na konci keď už máme nájdený optimálny model a to tak, že na nich vyhodnotíme jeho úspešnosť.

Pod pojmom generalizácia máme na mysli odolnosť modelu voči náhodnému šumu alebo aj výkonnosť modelu na nových dátach. K pojmu generalizácia sa viažu pojmy podučenie a preučnie. K podučeniu dochádza keď náš model nemá dostatočnú silu na aproximovanie náhodného rozdelenia, z ktorého sú dáta samplované. Ako príklad by sme mohli uviesť použitie jednoduchého perceptrónu na problem XOR. Naopak k preučeniu dochádza keď náš model je natolko silný, že sa snaží modelovať náhodný šum v dátach. V ľavo môžeme vidieť dobrý model a vpravo preučený.



Proti preučeniu sa dá bojovať rôznymi spôsobmi, jednak môžeme použiť skoré zastavenie modelu, čo je technika ktorá po každých pár epochách vyhodnocuje validačnú chybu. V prpade, že validačná chyba začne stúpať vrátime sa o krok späť a ukončíme trénovanie.

Ďalším spôsobom boja proti preučeniu je takzvaná regularizácia, pri ktorej sa môžeme napríklad snažiť penalizovať velké váhy pri jednotlivých neurónoch(jeden neurón má velký vplyv na výsledok).

Pri selekcii modelu potrebujeme zistiť nastavenie rôznych parametrov ako je počet vrstiev a počet neurónov v nich, rýchlosť učenia poprípade iné parametre. Vhodnou metódou zisťovania úspešnosti modelu je k-fold cross validation, čo je metóda pri ktorej rozdelíme dáta na náhodných k podmnožín. Následne vyberem $k-1$ z nich na ktorých model natrénujem a poslednú podmnožinu použijem na validáciu úspešnosti modelu. Toto spravím k krát - zakaždým trénujem a validujem na inej podmnožine. Suma sumárum dostanem k rôznych validačných hodnôt. Tie sa zvyknú spriemerovať a poprípade sa z nich zvykne vypočítať ešte aj smerodajná odchýlka.
Tento postup zopakujem pre všetky možnosti uvažovaných parametrov a vyberem model, ktorý ma najmenšiu priemernú chybu, prípadne vezmem do úvahy aj smerodajnú odchylku.

Pod pojmom deep learning sa rozumejú siete, ktoré majú viac vrstiev.

1.6 Lineárne modely NS: vzťah pre riešenie systému lin. rovníc v jednovrstvovej sieti, pojem pseudoinverzie matice, autoasociatívna pamäť: lineárny obal, princíp funkcie modelu, detektor novosti.

Nech máme trénovaciu množinu $A_{train} = \{(x^{(p)}, y^{(p)}), p = 1, \cdots, N\}$ a hľadáme maticu W, ktorá spĺňa

$$y^{(p)} = Wx^{(p)}, \forall p$$

V maticovej notácii

$$Y = WX$$

potom riešenie systému vieme jednoducho nájsť tým, že prenásobíme takýto systém inverznou maticou k matici X zprava a dostaneme teda

$$YX^{-1} = W.$$

Probém je v hľadaní inverznej matice k matici X pretože táto matica nemusí byť regulárna. Z tohto dôvodu sa zaviedol pojem pseudoinverznej(Moore-Penrose) matice, ktorú označujeme X^+. A má nasledovné vlastnosti $(\forall X \exists X^+)$

1. $XX^+X = X$
2. $X^+XX^+ = X^+$

3. X^+X a XX^+ sú symetrické

Vypočítat ich potom môžeme nasledovne

1. $X^+ = X^T(XX^T)^{-1}$ ak n < N a hodnost(X) = n.
2. $X^+ = (X^TX)^{-1}X^T$ ak n > N a hodnost(X) = N.

kde N je počet príkladov a n je dimenzia vstupu.

Chceli by sme natrénovať model X = WX, $N < n$ a chceme aby model vedel rekonštruovať N vstupov. Takýto model voláme lineárny autoasociátor. V prípade, že $N = n$ by sme dostali triviálne riešenie $W = I$, to ale nie je to čo chceme. Keď dostaneme zašumený vstup tak chceme odpovedať zapamätaným vzorom.

Linear manifold $L = \{x \in R^n | x = a_1x_1 + a_2x_2 + \cdots + a_Nx_N, a_p \neq 0\}, L \subset R^n$
Ortogonálny komplement = $L^\perp = \{x \in R^n | x \perp L\}$
A taktiež platí, že : $L \cup L^\perp = R^n$

Každý vektor z X vieme jednoznačne rozložiť na $x = x_{obal} + x_{orto}$ kde $x_{obal} \in L, x_{orto} \in L^\perp$.Tréningová množina $X = \{x_1, x_2, \cdots, x_n\}$ bude tvoriť náš lineárny obal L. Teraz keď dostaneme ľubovoľný vstup x, predpokladajme, že je zašumený, ale keďže ho vieme rozložiť tak nám stačí spraviť ortogonálnu projekciu $Wx = (XX^+)x = x_p$, čím dostaneme pattern ktorý je najbližšie danému vektoru. V prípade, že by sme spočítali $Wx = (I - XX^+)x = x_p$ potom $x_p \in L^\perp$, toto voláme detektor novosti.

1.7 Lineárne modely NS: účel Grammovho-Schmidtovho ortogonalizačného procesu, GI model. Pamäť korelačnej matice ako autoasociatívna pamäť, vzťah pre výpočet váh, presluch, porovnanie s GI.

Gramm-Schidtov ortogonalizačný proces vytvorí z báze $u_1, u_2, \dots u_n$ ortogonálnu bázu $v_1, v_2, \dots v_n$ takto:

$$v_1 = u_1$$

$$v_2 = u_2 - \frac{v_1^T u_2}{|v_1|^2} v_1$$

$$v_k = u_k - \sum_{i=1}^{k-1} \frac{v_i^T u_k}{|v_i|^2} v_i$$

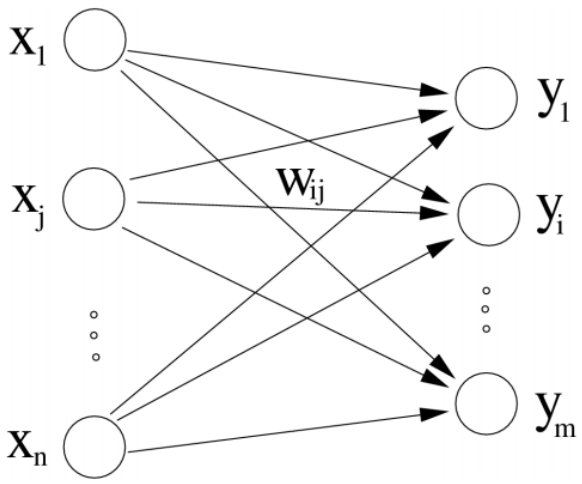
General Inverse model: Na to aby sme pridali ďalší vektor do lineárneho obal nepotrebujeme ho vždy nanovo prepočítať, ale stačí pridať nový vektor pomocou nasledujúceho postupu:
Nech $\widetilde{x}_1, \widetilde{x}_2 \dots \widetilde{x}_n$ sú vektory určené zo vstupov $x_1, x_2 \dots x_n$:

$$W(0) = 0$$

$$W(n+1) = W(n) + \frac{\widetilde{x}_{n+1}\widetilde{x}_{n+1}^T}{|\widetilde{x}_{n+1}|^2}$$

Kde $\widetilde{x}_{n+1} = x_{n+1} - W(n)x_{n+1}$

Pamäť korelačnej matice



Váha w_{ij} je priamo umerna korelacii: $w_{ij} \approx \sum_{k=1}^{n} x_j^k y_i^k$ čo sa v maticovom prevedení dá napísať ako $W \approx YX^T$. Uvažujme, ale autoasociatívny prípad: $W \approx XX^T$ a ak sú vstupné vektory ortonormálne dostávame $X^T = X^{-1} = X^+$ a tento model je totožný s GI.

Rekurzívny výpočet CMM (Correlation matrix memory):

$$W(n+1) = W(n) + x^{(n+1)}x^{(n+1)T}$$

Presluch sa dá vyjadruje takto:

Odpoveď na vstup ľubovoľné vstup x_p je vyjadrená:

$$Wx^p = XX^Tx^p = \sum_{k=1}^{n} x^k x^{kT} x^p = x^p x^{pT} x^p + \sum k = 1; k! = p^n x^k x^{kT} x^p = x^p |x^p|^2 + C(p)$$

a práve C(p) označuje presluch. Ak by bol presluch nulový tak vstupy $x_1 \dots x_2$ sú ortogonálne. Hodnota presluchu sa dá znížiť posunutím strednej hodnoty zložiek vstupov do nuly.

Krátke vysvetlenie: CMM sa snaží zachytiť korelácie medzi jednotlivými zložkami a na základe nich previazať vstupy zo vstupnej na výstupnú vrstvu (vyššia korelácia => vyššia hodnota váhy). Model sa opiera iba o previazanosti medzi dvojicami a nie previazanosti napr. trojíc, štvoríc, ... **Porovnanie** Ak sú vsupy dostatočne odlišné tak CMM je rýchlejšia alternatíva ku GI. Ale inak GI dáva lepšie výsledky.

2 Samoorganizácia a RBF sieť. Otázky 8 až 12.

2.1 Samoorganizácia v NS, základné princípy, pojem učenia bez učiteľa, typy úloh použitia, Ojovo pravidlo učenia pre jeden neurón, vysvetlenie konvergencie.

4 základne princípy samoorganizácie:

1. Samo-zosilnenie, zmena váh ma sklon k zosilneniu
2. Konkurencia - medzi neurónmi, vzhľadom na obmedzené zdroje
3. Spolupráca – medzi susednými neurónmi
4. Konštrukčná informácia – je získavaná zo vstupných dát ako „knowledge“

Učenie bez učiteľa je algoritmus učenia, ktorý nemá informáciu o požadovaných aktivitách výstupných neurónov v priebehu trénovania o ktoré by sa mohol opierať. Pojem učenie bez učiteľa sa používa na opis širokej škály rôznych učiacich sa úloh. Úlohy tohto typu analyzujú sadu objektov, ktoré nemajú priradenú triedu.

Typy úloh:

- Klasterizácia údajov (vektorová kvantizácia)

- PCA, redukcia dimenzie pričom sa snažíme čo najviac zachovať vzájomné vzťahy
- Topologické zobrazenie príznakov
- Kompresia dát, tak aby sme zachovali čo najviac z pôvodných

Predpokladajme, že máme jeden neurón s n vstpmi $y = \sum_{j=1}^{n} w_j x_j = \mathbf{w}^T\mathbf{x}$ Ojovo pravidlo je pravidlo, ktoré hovorí o zmene váh medzi neurónmi. Je to modifikácia štandardného Hebbovho pravidla a vyzerá nasledovne:

$$w_j(t+1) = \frac{w_j(t) + \alpha y x_j}{||\mathbf{w(t)} + \alpha y \mathbf{x}||}$$

Pre malé α môžeme pomocou taylorovho rozvoja zapísať aj v tvare:

$$w_j(t+1) = w_j(t) + \alpha y x_j - \alpha y^2 w_j(t)$$

V prípade jedného neurónu, jeho váhový vektor w konverguje k vlastnému vektoru matice $R < xx^T >$ alebo k prvému hlavnému komponentu. Rozptyl nášho neurónu $\sigma^2(n) =< y^2(n) >$, potom konverguje k hlavnému vlastnému číslu. TODO konvergencia nedostatočná

2.2 Metóda hlavných komponentov pomocou algoritmu GHA a APEX, architektúra modelu, vzťah pre adaptáciu váh, pojem vlastných vektorov a vlastných čísel, redukcia dimenzie, aplikácia na kompresiu obrazu.

Metóda hlavných komponentov nám v priestore parametrov trénovacích dát nájde také smery, v ktorých majú dáta najväčšiu varianciu. Následne keď chceme redukovať dimenzionalitu pristoru predpokladáme, že smery s najvačšou varianciou sú najdôležitejšie.

Pozrime sa na algoritmus GHA. Architektúra modelu GHA je jednovrstvová sieť s n vstupmi a p výstupmi. Generalizovaný Hebbovský algoritmus na aktualizáciu váh je v tvare

$$\Delta w_{ij} = \alpha y_i (x_j - \sum_{k=1}^{p} y_k w_{kj}).$$

To čo GHA robí je, že extraktuje p hlavných komponentov korelačnej matice vstupných dát. Výhodou oproti klasickému PCA je, že nemusíme počítať korelačnú maticu a zároveň je to výpočtovo o dosť lacnejšie ak máme prípad $p << n$. Taktiež sa dá dokázať, že po skonvergovaní dostaneme usporiadané hlavné komponenty a taktiež, že výsledok je reprodukovatelný až na znamienka.

Adaptive Principal component EXtraction(APEX) - je algoritmus, ktorý používa opačný spôsob učenia, tj. anti-Hebbovské učenie. Architektúra siete je opať jednovrstvová ale teraz má naviac laterálne spojenia(v rovnakej vrstve). Hlavné komponenty hľadá iteratívnym prípstupom, že keď by dostala $i-1$ hlavných komponentov tak z nich vypočíta i-ty hlavný komponent. I-ty neurón má teda okrem klasických váh w_i aj laterálne

$$u_i = [u_{i1}, \ldots, u_{i-1}]^T.$$

Výstup siete spočítame pomocou vzťahu

$$\mathbf{y}_i = \mathbf{w}_i^T\mathbf{x} + \mathbf{u}_i^T\mathbf{y}_{i-1}, \text{ kde } \mathbf{y}_{i-1} = [y_1, y_2, \ldots, y_{i-1}]^T.$$

Aby sme našli hlavné komponenty, dopredné váhy trénujeme pomocou Ojovho pravidla a laterálne váhy pomocou anti-Hebbovského pravidla(inhibičného), ktoré má tvar podobne ako klasické Hebbovské pravidlo akurát je tam mínus:

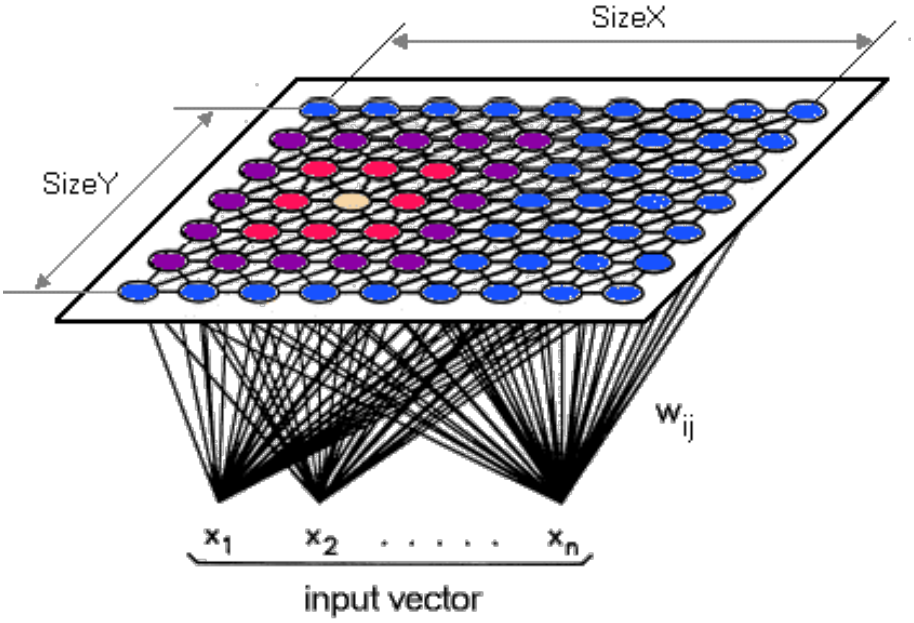
$$\Delta u_{ik} = -\alpha y_i (y_k + y_i u_{ik}).$$

Keď to správne naimplementujeme, dopredné váhy by mali konvergovať k vlastným vektorom korelačnej matice vstupov a laterálne interakcie k nulovému vektoru.

Nech máme ľubovoľný obrázok vieme ho previesť do šedotónového. Následne môžeme na podobrázkoch velkosti 8x8 spustiť naše PCA algoritmy, ktoré nájdu vlastné vektory k týmto podobrázkom. To čo vidím, že sa deje je nejaká forma rasterizácie.

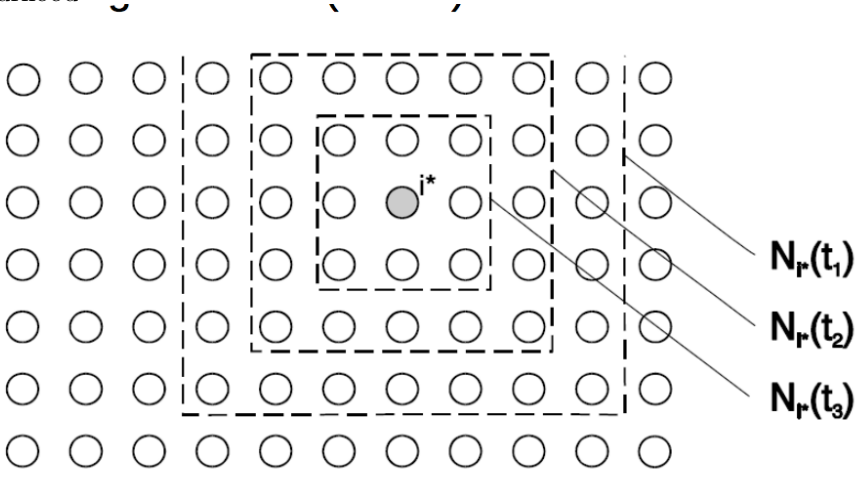
2.3 Učenie so súťažením (typu "winner-take-all"), nevýhody. Neurobiologická motivácia algoritmu SOM, laterálna interakcia a jej náhrada v SOM, sumarizácia algoritmu, voľba parametrov modelu.

Učenie so súťažením je biologicky motivované tak, že čím viac sa synapsie používajú tým by mali byť silnejšie. Výskumníci sa tiež inšpirovali modelom toho ako sietnica mapuje svoje impulzy v mozgu. Model samoorganizujúcej sa mapy(SOM) je model s dvomi vrstvami, vstupnou a výstupnou. Výstupná vrstva zvykne byť väčšinou organizovaná v mriežke, najčastejšie 2D(kvôli vizualizácii) ale občas sa využíva aj viac D mriežka. Každý neurón na vstupnej vrstve je prepojený s každým na výstupnej.



V prípade učenia typu "winner-take-all" sa ku každému vstupnému vzoru nájde jeden neuón(tzn. BMU - best matching unit) $bmu_c = max_i\{\mathbf{w}_i^T\mathbf{x}\}$, ktorý je následne pritiahnutý vstupným vzorom k sebe $\Delta w_c = \alpha(x - w_c)$. Nevýhodou tohto prístupu je, že veľa neurónov ostane na svojej pôvodnej pozícii a v podstate ničomu nepomáhajú(dead neurons).

Neskôr sa vymyslelo, že neuróny budú mať v mriežke topológiu(umiestnenie) a budeme sa učiť spôsobom "winner-take-most" tak, že neuróny v okolí budú spolupracovať. V prípade, že sú blízko vzruchu a spojenie sa využíva tak ho posilňujeme v opačnom prípade ho potlačujeme. Túto spoluprácu nazývame laterálna interakcia. V SOM-ke sme to nahradili výpočtovo efektívnejším modelom tak, že upravujeme iba neuróny v určitom okolí BMU, a okolie sa s postupným časom učenia zmenšuje. Ako príklad funkcie okolia si môžeme uviesť napríklad "rectangular neighbourhood"



Alebo alternatívne gausovské okolie dané vzťahom $h(i^*, i) = exp(\frac{d_E^2(i^*,i)}{\lambda^2}(t))$, kde lambda sa postupne zmenšuje $\lambda(t) = \lambda_i(\frac{\lambda_f}{\lambda_i})^{t/t_{max}}$.
λ_i je lambda na začiatku výpočtu a λ_f je lambda na konci výpočtu. t a t_{max} je aktuálna iterácia a celkový počet iterácii.

Suma sumárum algoritmus vyzerá nasledovne:

- Zoberieme náhodný vstup x a najdeme k nemu BMU

$$i^* = argmin_i||x - w_i||.$$

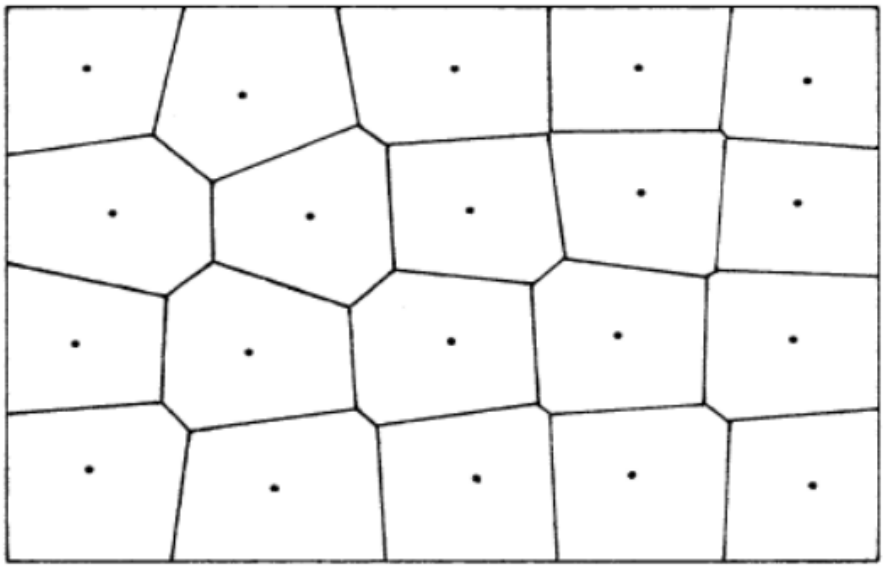
- Upravíme na základe BMU váhy :

$$w_i(t+1) = w_i(t) + \alpha(t)h(i^*, i)[x(t) - w_i(t)]$$

- Updatneme parametre(susednost, rychlost ucenia) SOM a opakujeme do konvergencie.

2.4 SOM: vektorová kvantizácia, topografické zobrazenie príznakov, algoritmus SOM, parametre, redukcia dimenzie, magnifikačná vlastnosť, príklad použitia.

Úlohou vektorovej kvantizácie je nahradiť množinu vstupných dát X množinou referenčných vektorov takzvaných prototypov. To znamená že namiesto pamätania si celej množiny vstupných dát stačí si pamätať oveľa menšiu množinu prototypov. Zároveň si treba aj pamätať príslušnosť každého vstupného vektoru k jednému z prototypov (k tomu ku ktorému je najbližšie, Euklidovská vzdialenosť). Touto kvantizáciou nám vznikne tzv. Voronoiho mozaika.

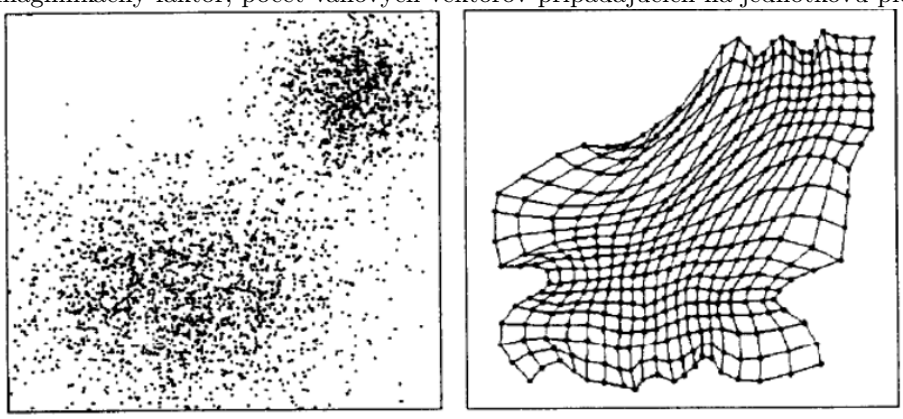


Bodky sú prototypy a ku každému prototypu prislúcha oblasť vstupných dát ktoré prislúchajú danému prototypu. Kritériom vektorovej kvantizácie je nájdenie optimálnych pozícií týchto prototypov. Ak sa pozeráme na prototypy ako na váhové vektory, predstavuje algoritmus SOM štandardný vektorový kvantifikátor.

Oba algoritmy PCA aj SOM umožňujú extrahovať hlavné príznaky, hlavné črty vstupných dát. Účelom extrakcie hlavých príznakov je predovšetkým redukcia dimenzie pričom sa snažíme čo najviac zachovať vzájomné vzťahy. Redukciou dimenzie sa uľahčí spracovávanie dát a zároveň získame možnosť vizualizácie. Okrem iného, rozdiel medzi PCA a SOM spočíva v spôsobe reprezentácie príznakov. Pri PCA je na reprezentáciu jedného príznaku použitý len jeden neurón (hodnota príznakov je kvantifikovaná výstupmi neurónov), v prípade SOM sa na reprezentácii podieľajú všetky neuróny (hodnota príznakov je daná pozíciou víťaza). S tým súvisí špecifická vlastnosť SOM - extrahované príznaky sú topologicky zobrazované (angl. feature mapping), a to pozdĺž koordinát mriežky SOM.

Magnifikačná vlastnosť je vlastnosť mapy aproximovať čo najlepšie distribúciu vstupných dát. V oblastiach kde

sú zhustené vstupné dáta bude tak isto zhustené rozloženie váhových vektorov siete. Takúto tendenciu algoritmu SOM možno interpretovať ako snahu o optimálne rozloženie svojich zdrojov. Túto vlastnosť algoritmu popisuje magnifikačný faktor, počet váhových vektorov pripadajúcich na jednotkovú plochu vstupného priestoru.

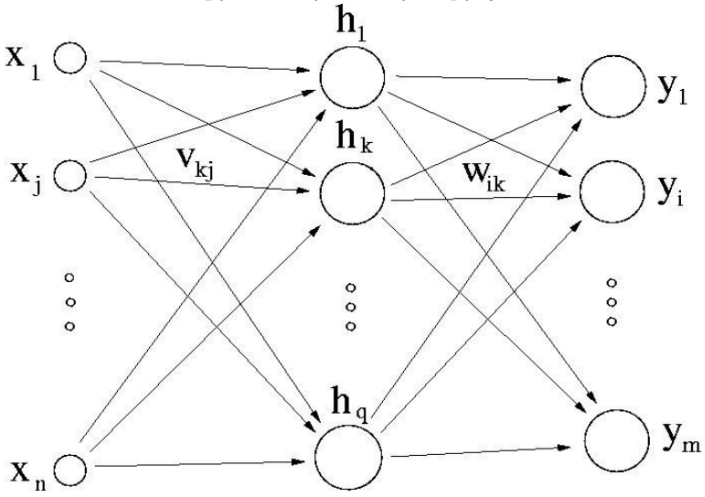


Aplikácií SOM je veľa. Spomenuli sme rozpoznávanie reči a robotiku. Pri rozpoznávaní reči sme transformovali akustický rečový signál na sekvenciu hlások pričom sme si vytvorili tzv. fonémovú mapu. Pri robotickom ramene je úlohou dostať koncový bod ramena do určitej pozície. Obrázky sú na slajdoch ale nemyslím si že to chce podrobne vysvetliť.

2.5 Hybridné modely NS, RBF model: aktivačné vzorce, bázové funkcie, príznakový priestor, problém interpolácie, trénovanie modelu, aproximačné vlastnosti RBF siete.

Tento model je istou kombináciou učenia s učiteľom a bez učiteľa. Funguje to veľmi dobre pokiaľ pre podobné vstupy očakávame podobné výstupy. Väčšinou vyžadujeme viac neurónov ako pri ostatných modeloch učených iba s učiteľom. Konkrétne sa pozrieme na model Radial Basis Function neural network.

Tradične máme vstupy x, váhy w a výstupy y.



Výstupné aktivácie budú teda podla schémy

$$y_i = \sum_{k=1}^{q} w_{ik} h_k(x) + w_{i0}$$

, kde h_k je radiálna aktivačná funkcia, ako napríklad $exp(-\frac{||x-v_k||^2}{\sigma_k^2})$, v_k je centrum k a σ_k je rozsah.

Cover theorem:
A complex pattern classification problem cast in a high dimension space nonlinearly is more likely to be lineary

separable than in low dim. space.

Interpolation problem:
Pre RBF v podstate dostaneme systém lineárnych rovníc $\mathbf{w}^T\mathbf{h}_i = d_i, i = 1, 2, \ldots, N$. Ak H^{-1} existuje potom riešením je $w = H^{-1}d$. Ako si môžeme byť ale istí, že interpolačná matic H nie je singulárna?. Na pomoc nám prichádza Michelliho veta:

> Nech $x_i \in R^N$ je množina rôznych bodov, potom $H(N \times N)$ ktorej $h_{ij} = \phi_{ij}(||x_i - x_j||)$, nie je singulárna. Veľa BRF funkcií túto podmienku spĺňa.

Ako príklady bázových funkcií si môžeme uviesť napríklad nasledovné:

- Gaussian $\phi(r) = exp(-\frac{r^2}{\sigma^2})$
- Multiquadrics $\phi(r) = (r^2 + c^2)^{1/2}$
- Inverse multiquadrics $\phi(r) = (r^2 + c^2)^{-1/2}$
- Cauchey $\phi(r) = \frac{1}{1+r^2}$

Park a Sandberg dokázali, že za určitých predpokladov (viz Farkaš slidy 136.) existuje pre každú spojitú funkciu f(x) RBF sieť s centrami v_k a rovnakou veľkosťou $\sigma > 0$ taká, že F(x) je blízko f(x). Tj. taká, ktorá dobre aproximuje funkciu f(x).

Trénovanie tejto siete prebieha tak, že rôzne trénujeme prvú vrstvu a inak druhú.

- 1. vrstva - môžeme trénovať napríklad pomocou K-means alebo inej clustrovacej metódy

  Ak sú dáta distribuované v nejakej štruktúre môžeme použiť napríklad nasledovný vzťah:

  $$G(||x - v_i||^2) = exp(\frac{-K||x - v_i||^2}{d^2_{max}}),$$

  kde K je počet centier, $d_{max} = max_{kl}\{||v_k - v_l||\}$
  Alebo môžeme použiť K-means kde centrá položíme randomne alebo na nejaké trénovacie body, pre každý trénovací sample nájdeme víťazný stred a tie zaradíme do jedneho clusteru. Teraz updatneme pozíciu stredov tak aby boli v strede svojho clusteru a opakujeme od zaciatku az do konvergencie.
- 2. vrstva - pomocou SGD alebo výpočtom pseudoinverznej matice H', kde potom $W = H'D$

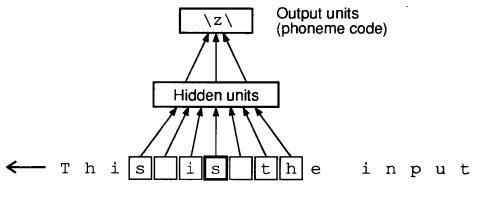
3 Rekurentné a pamäťové modely. Otázky 13 až 18.

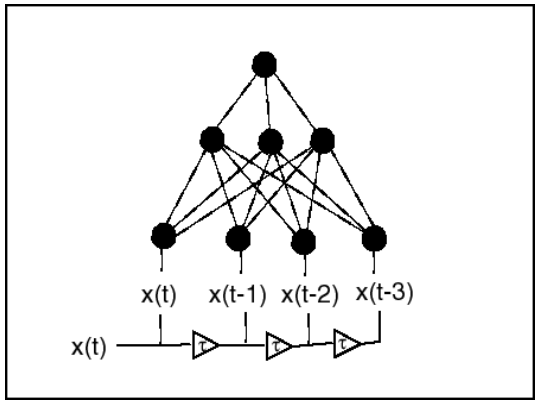
3.1 NS na spracovanie sekvenčných dát: reprezentácia času, typy úloh pre rekurentné NS. Modely s časovým oknom do minulosti, výhody a nedostatky, príklad použitia.

Pri spracovaní sekvenčných dát je dôležité, aby výstup siete nebol závislý iba od súčasnej hodnoty, ale aj od predchádzajúcich (prípadne nasledujúcich - bidirectional RNN) hodnôt sekvencie. Tento typ siete je teda vhodný pre riešenie typov úloh, kde výsledok závisí od celého kontextu spracovávaného vstupu. Ide teda napríklad o klasifikácia sekvencií (spracovanie reči - NLP), predikcia alebo generovanie nových sekvencií.

3.1.1 Nerekurentné modely

Existujú 2 typy sietí - rekurentné (viď ďalšiu otázku) a nerekurentné. Pri nerekurentných modeloch väčšinou hovoríme o dopredných sieťach (MLP), ktoré sa môžu trénovať klasickým back-propagation algoritmom. Aj dopredné siete môžu byť použité na spracovanie sekvencií - použitím tzv. časového okna. Pri tejto technike neplníme sieť iba aktuálnou hodnotou, ale máme fixný počet vstupných neurónov pre predchádzajúce príp. nasledujúce hodnoty sekvencie.

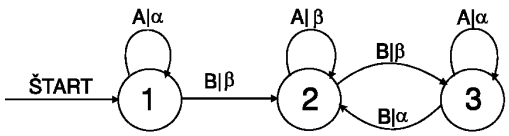




Tento prístup bol napríklad použitý pri určení výslovnosti anglických hlások (NETtalk), trénovaní FIR filtra (focused neuronal filter alebo rozpoznávanie vyslovených hlások zo spektogramu. Problém pri tomto modely je v tom, že nevie spracovať ľubovolne dlhú sekvenciu - počet vstupných neurónov musí byť fixný a sieť nemá spätnú väzbu od vstupov. Avšak na rozdiel od rekurentných sietí sa jednoduchšie trénuje a nepodlieha napr. problému miznúceho gradientu.

3.2 Rekurentné NS: princíp trénovania pomocou algoritmu BPTT a RTRL. Príklad použitia.

Graf dopredných sietí tvorí DAG, avšak rekurentné siete môžu obsahovať aj cykly. Hlavnou myšlienkou rekurentných sietí je spätná väzba vstupu - určenie stavu v závislosti od predchádzajúcich vstupov. Pomocou nich sa dá napríklad modelovať mealy-ho automat. Je to niečo ako konečný automat z foje - začíname v určitom stave a do dalších stavov sa presúvame v závislosti od aktuálneho vstupu a stavu, v ktorom sa aktuálne nachádzame. Pravidlá týchto prechodov je možné natrénovať vhodnou rekurentnou sieťou (dopredným modelom s časovým oknom do minulosti to zrejme nie je možné).

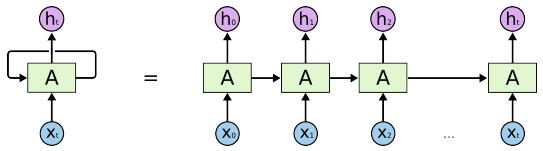


Medzi čiastočne rekurentné siete s kontextovou jednotkou patrí:

- Elman - Spätná väzba zo skrytej vrstvy, vie rozpoznať a generovať sekvencie a robiť predikcie. Znázornená na obrázku nižšie.
- Jordan - Spätná väzba výstupnej vrstvy
- Stornetta - moveing average (MA) predchádzajúcichaktivácií (IIR filter)
- Mozer - nedá sa použiť Backpropagation

3.2.1 Back-propagation through time - BPTT

Rozšírenie klasického BP - rekurentnú sieť "rozbalíme" na doprednú sieť, s hĺbkou rovnou dĺžke sekvencie.



kde x_i reprezentuje vstup, A reprezentuje stav a h_i výstup. Hodnoty stavov sú dané vzťahom:

$$A_i(t+1) = f(\sum_j w_{ij} A_j(t) + x_i(t))$$

Back propagation musí byť aplikovaný po spracovaní každej sekvencie. Cieľom je optimalizovať chybovú funkciu:

$$E(T) = \frac{1}{2} \sum_{t=1}^{T} \sum_{i \in O} e_i^2(t)$$

kde T je dĺžka sekvencie. Nech:

$$\delta_i(t) = \begin{cases} f'(net_i) e_i(t), & t = T \quad (3.1) \\ f'(net_i)(e_i(t) + \sum_{l \in O} w_{li} \delta_l(t+1))), & 1 < t < T \quad (3.2) \end{cases}$$

Potom je update váh:

$$\Delta w_{ij} = -\alpha \frac{\partial E(T)}{\partial w_{ij}} = \alpha \sum_{t=2}^{T} \delta_i(t) A_j(t-1)$$

Nepraktické pre dlhé sekvencie (neznámej dĺžky), problém miznúceho gradientu .. podobne ako pri hlbokých sieťach.

3.2.2 Real-time recurrent learning - RTRL

Ako názov napovedá, ide o algoritmus schopný učiť sa real-time. Cieľom je optimalizovanie chybovej funkcie:

$$E(t) = \frac{1}{2} \sum_{i \in O} e_i^2(t)$$

zderivovaním dostaneme update váh:

$$\Delta w_{ij} = -\alpha \frac{\partial E(T)}{\partial w_{ij}} = f'(net_k(t))[\delta_{ki}^{kr} A_j(t-1) + \sum_l \frac{w_{kl} \partial A_l(t-1)}{\partial w_{ij}}]$$

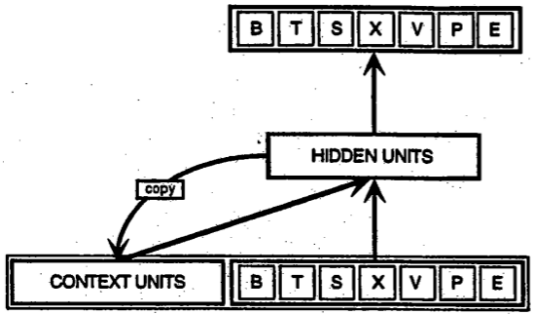
kde l sú neuróny vstupujúce do neurónov k, $e_i(t) = d_i(t) - A_i(t), i \in O$ (ak je výstup k dispozícii) a platí:

$$\delta_{ki}^{kr} = \begin{cases} 1, & \text{ak } k = i \quad (3.3) \\ 0, & \text{inak} \quad (3.4) \end{cases}$$

Teacher forcing - nahradzovanie aktuálnych výstupov siete želanými výstupmi (ak sú k dispozícií). Môže urýchliť učenie.

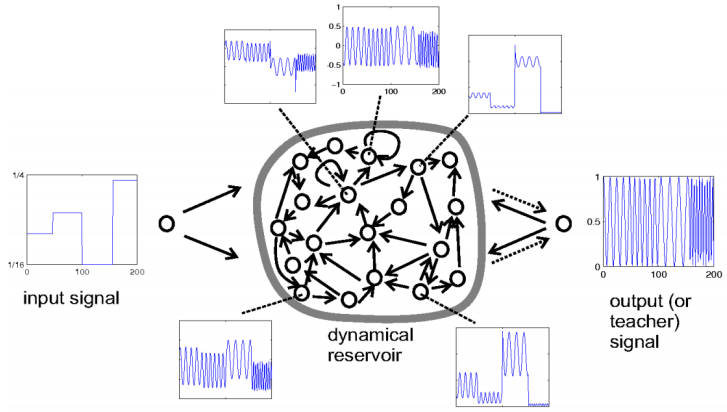
Tento typ učenia má veľmi veľké pamäťové a časové nároky.

3.3 Elmanova sieť: interné reprezentácie pri symbolovej dynamike, Markovovské správanie, architekturálna predispozícia. Model rekurzívnej SOM (RecSOM).



3.4 Sieť s echo stavmi (ESN): architektúra, inicializácia, trénovanie modelu, vplyv parametrov na vlastnosti rezervoára, echo vlastnosť, pamäťová kapacita.

Sieťe s echo stavmi sú typ rekurentnej neurónovej siete, ktorá má vstupnú vrstvu, rezervoár a výstupnú vrstvu. Spojenia na vstupnej vrstve a v rekurentnej vrstve sa snažíme iba vhodne nainicializovat ale netrénujeme ich. To čo trénujeme je výstupná vrstva. Keďže sa teda snažíme trénovať len výstupnú vrstvu tak to vieme ľahko spraviť analyticky, čo je jednak rýchle a zároveň sa aj ľahko implementuje.



Na inicializáciu vstupných váh používame malé hodnoty z normálneho alebo rovnomerného rozdelenia. Rezervoár sa snažíme inicializovať tak, aby ma echo-state vlastnosť.

Definition 2.1 (*Echo State Property*). A network $F : X \times U \to X$ (with the compactness condition) has the echo state property with respect to U: if for any left infinite input sequence $u^{-\infty} \in U^{-\infty}$ and any two state vector sequences $x^{-\infty}, y^{-\infty} \in X^{-\infty}$ compatible with $u^{-\infty}$, it holds that $x_0 = y_0$.

Výstupnú vrstvu trénujeme pomocou pseudoinverznej matice X. Nech máme vstup u_i a funkciu f, vzťahy pre prechod sieťou vyzerajú nasledovne:

- $x(t) = f(W^{res}x(t-1) + W^{inp}u(t))$
- $y(t) = f^{out}(W^{out}x(t))$

Kapacita pamäte prudko závisí od spektrálneho rádiusu, zvykne sa nastaviť zhruba na velkosť 0.9, ktorá ju optimalizuje. Spočítať ju môžeme takto:

$$MC = \sum_{k=1}^{k_{max}} MC_k = \sum_{k=1}^{k_{max}} \frac{cov^2(u(t-k), y_k(t)}{var(u(t))var(y_k(t))}$$

3.5 Hopfieldov model NS: deterministická dynamika, energia systému, relaxácia, typy atraktorov, autoasociatívna pamäť – nastavenie váh, princíp výpočtu kapacity pamäte.

Hopfieldov model neurónovej siete vyzerá tak, že má jednu vrstvu, kde každý neurón je prepojený s ostatnými. Každý z neurónov nadobúda stav $S_i = \{-1, 1\}, i = 1, \ldots, n$ a má váhy J_{ij}. Ak $J_{ij} > 0$ nazývame ju excitačná inak inhibičná a definitoricky váha $J_{ii} = 0$.

V prípade, že chceme spočítať update váh najprv musíme spočítať:

1. Postsynaptický potenciál - $h_i^{int} = \sum J_{ij} S_j$.
2. Excitačná hranica(threshold) h_i^{ext}.
3. Efektívny postsynaptický potenciál $h_i = h_i^{int} - h_i^{ext}$.
4. Neuron state update(deterministic) $S_i \leftarrow sgn(h_i) \in \{-1, 1\}$ ak $h_i = 0$ potom $sgn(h_i) = 1$.

Update môže prebiehať buď synchrónne(všetky naraz) alebo asynchróne(randomne po jednom). Je fajn si uvedomiť, že v prípade synchrónneho updatu sa hýbeme po vrcholoch hyperkocky ale v prípade asynchrónneho po jej hranách.

V každom stave siete vieme vypočítať takzvanú energiu siete $E = -\frac{1}{2} \sum_i \sum_j J_{ij} S_i S_j - \sum_i S_i h_i^{ext}$

Dá sa ukázať, že ak používame asynchrónny update s excitačným thresholdom $h_i^{ext} = 0, \forall i$ a symetrickou konektivitou neurónov $J = J^T$ energia vždycky klesá počas relaxácie(updatovania neurónov).

Atraktory delíme na pravé a falošné(lineárna kombinácia zapamätaných vzorov).

V autoasociatívnej pamäti chceme nastaviť váhy tak, aby bodovými atraktormi boli naše zapamätané patterny. Predpokladajme, že máme binárne patterny $x(p) = [x_1^{(p)}, \ldots, x_n^{(p)}]$ $p = 1, \ldots, N$, potom váhy nastavíme podľa nasledovného vzťahu:

$$J_{ij} = \frac{1}{n} \sum_p x_i^{(p)} x_j^{(p)} \text{ for } i \neq j \text{ and } J_{ii} = 0$$

Keď sieť relaxujeme z $S(0) \to \cdots \to x_i^{(r)}$ potom podmienka stability pre vzor $x_i^{(r)}$ je nasledovná

$$x_i^{(r)} \times h_i^{(r)} = x_i^{(r)} \sum_j J_{ij} x_i^{(r)} = \cdots = 1 + C_i^{(r)} > 0$$

, kde $C_i^{(r)}$ voláme crosstalk(šum). Ak sú vzory na seba navzájom kolmé potom šum je $C_i^{(r)} = 0$ a kapacita pamäte je rovná počtu vzorov.

Kapacitu pamäte môžeme merať pomocou toho, že zistíme aká je pravdepodobnosť, že i-ty neurón je nestabilný. $P_{error} = P(C_i^{(r)} > 1)$. Táto pravdepodobnosť priamo závisí od počtu patternov a počtu neurónov. $C_i^{(r)} \sim Bin(0, \sigma^2)$ kde $\sigma^2 = N/n$. Z vety o centrálnej limite potom platí, že $Bin \approx N(0, \sigma^2)$.

3.6 Nelineárne dynamické systémy: stavový portrét, dynamika, typy atraktorov. Hopfieldov model NS: stochastická dynamika, parameter inverznej teploty, princíp odstránenia falošných atraktorov.

TODO