Invatare automata

Universitatea Politehnica Bucuresti

Anul universitar 2021-2022

Adina Magda Florea

Conținut curs

- Introducere
- Clasificare și regresie
- Support Vectors (SVM)
- Rețele neurale
- Rețele neurale adânci
- Învățare prin recompensă
- Algoritmi genetici
- Teoria învățării computaționale

Cerințe

Notare

- **Activitate laborator - 20%**
- **Teme de casa - 30%**
- **Lucrare 1 - 20%**
- **Lucrare 2 - 30%**
- **Teste curs: puncte bonus**

Cerintele minimale pentru promovare:

- Minim 7 prezente la laborator (in lipsa a 7 prezente, cursul si laboratorul se refac in anul universitar urmator)
- 50% din punctajul Activitate laborator + Teme de casa + Lucrare 1
- 50% din punctajul lucrarii 2

Platforme ML - WEKA

Weka 3 - Data Mining Software in Java

- Weka contine implementarea unei multimi de algoritmi de invatare automata pentru “data mining”
- Weka contine instrumente pentru preprocesare, clasificare, regresie, clusterizare, reguli de asociere si vizualizare
- http://www.cs.waikato.ac.nz/ml/weka/
- Machine Learning Group at the University of Waikato

Platforme ML - SCIKIT Learn

Scikit Learn - algoritmi de ML in Python

- Data mining si analiza datelor
- Open source
- Contine algoritmi de clasificare, regresie, clustering etc.
- http://scikit-learn.org/stable

Platforme ML

TensorFlow – ML si deep learning

- Utilizeaza grafuri de flux de date (data flow graphs).
- Nodurile din graf reprezintă operații matematice, arcele reprezintă vectori (tensors) multidimensionali comunicați între operații

https://www.tensorflow.org/

PyTorch – bibliotecă in Python

- Tensor computation
- Deep Learning platform

http://pytorch.org/

Platforme ML

Core ML – biblioteca care permite integrarea ML în aplicații Apple (Apple)

- Aplicatii de vision, NLP si arbori de decizie
- https://developer.apple.com/machine-learning/

Michelangelo learning platform

- ML-as-a-service platform
- Manage data, Train models, Evaluate models, Deploy models, Make predictions, Monitor predictions
- https://eng.uber.com/michelangelo/ (Uber)

ONNX

- ONNX – Open Neural network Exchange
- open format pentru reprezentarea modelelor de deep learning
- Permite portarea modelelor de deep learning între diferite platforme

https://onnx.ai/

Multi parteneri industriali

1. Definiții

- Învățarea este procesul prin care un sistem isi imbunatateste performantele (Herbert Simon)
- Învățarea este achizitia cunostintelor explicite
- Învățarea este achizitia deprinderilor de rezolvare a problemelor
- Învățarea este formare teoriilor, formarea ipotezelor si inferența inductivă
- ML – observa cantitati mari de date și caută șabloane petru predicție

Curs nr. 1

- **Introducere**
- **Caracteristici ale invatarii automate**

Sistem de invatare
Element de invatare
Feed-back
Date
Rezultate invatare
Mediu
Rezolvare probleme
Profesor
Rezultate
Evaluare performante

Denumiri utilizate

- Instanță
- Concept
- Concept vizat (target concept)
- Clasă de ipoteze
- Mulțimea de învățare (Training set)
- Mulțimea de test (Test set)

Denumiri utilizate

- T – vector de intrare, vector sablon, vector de caracteristici, esantioane, exemple, instanțe
- x_i- caracteristici, atribute, variabile de intrare, componente
- x_i - valori reale, valori numerice intregi, valori simbolice, valori booleene
- $f(\mathbf{X_i})$
  - valori reale: h – functie de esantionare
  - valori simbolice: h – clasificator
  - boolene: 1 – instanta pozitiva, 0 – instanta negativa

Tipuri de invatare

- **Învățare supervizată** – determinarea ipotezei de invatare pe baza unor date etichetate
  - Simbolica sau non-simbolica
- **Învățare nesupervizată** - determinarea ipotezei de invatare / a unei structuri pe baza unor date neetichetate
  - Simbolica sau non-simbolica
- **Învățarea prin recompensa**

Model simplu

$T = \{\mathbf{X_1}, \mathbf{X_2}, \ldots, \mathbf{X_m}\}$ – **multime de invatare**

$$\mathbf{X_i} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ . \\ . \\ x_n \end{pmatrix} \longrightarrow \boxed{h} \longrightarrow h(\mathbf{X_i})$$

$h \in \mathbf{H}$

$f(\mathbf{X}) = ?$

- **Invatare supervizata** – se cunosc $f(\mathbf{X_1}), \ldots, f(\mathbf{X_m})$

Gasim **h** a.i. $h(\mathbf{X_i}) = f(\mathbf{X_i})$, $i=1,m \rightarrow h(\mathbf{X_i}) = f(\mathbf{X_i})$, $\forall i$

Clasificare – f - valori discrete – grupeaza exemple

Regresie – f – valori continue, estimeaza sau prezice valori

Metode de invatare supervizata

Clasificare

- Arbori de decizie
- Clasificare probabilistica (Naïve Bayes)
- K-Nearest neighbours (k-NN pt clasificare)
- SVM
- Retele neurale
- Invățare mulțime (ensemble learning): păduri aleatoare, ADA boost

Metode de invatare supervizata

Regresie

- Regresie liniara
- SVR
- Arbori de regresie
- K-Nearest neighbours (k-NN pt regresie)

Model simplu

$T = \{\mathbf{X_1}, \mathbf{X_2}, \ldots, \mathbf{X_m}\}$ – **multime de invatare**

$$\mathbf{X_i} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ . \\ . \\ x_n \end{pmatrix} \longrightarrow \boxed{h} \longrightarrow h(\mathbf{X_i})$$

$h \in \mathbf{H}$

$f(\mathbf{X}) = ?$

- **Invatare ne-supervizata** – **NU** se cunosc $f(\mathbf{X_1}), \ldots, f(\mathbf{X_m})$

Imparte T in submultimi – clase

Se poate vedea tot ca invatarea unei functii – val f = numele submultimii careia ii apartine $\mathbf{X_i}$

- **Invatare prin recompensa** – Se cunosc recompensele pentru valorile $h(\mathbf{X_1}), \ldots, h(\mathbf{X_m})$, Nu se cunosc valorile lui f

Metode de invatare nesupervizata

- Clustering
  - k-means clustering (grupare), k-means ierarhic (grupare ierarhica)
  - Retele neurale cu auto-organizare
  - Autoencoders
  - Deep belief networks
- Density estimation- determinarea distributiei datelor in spatial de intrare
- Vizalisation – proiectarea unui spatiu multi-dimensional in 2 sau 3 dimensiuni

Metode de invatare nesupervizata

- Expectation maximization (EM)
  - HMM – algoritmul Baum-Welch
  - Retele Bayesiene – estimarea parametrilor in cazul datelor incomplete
  - Soft clustering – clasele se pot suprapune
- Principal Component Analysis (PCA)

Caracteristici importante

- **Regimuri de invatare:**
  - Batch
  - Incremental
- **Zgomot:**
  - zgomot intrari (de ex valorile atributelor)
  - zgomot iesiri (alterare iesiri)
- **Ipoteza favorita a inductiei** (Inductive bias)
  - O multime de presupuneri (explicite sau implicite) pe care algoritmul de invatare se bazeaza pentru a obtine un model (a generaliza) din setul de invatare

Inductive bias

- Spatiu de ipoteze restrictionat (Restricted Bias)
  - Functii liniare sau polinomiale de ordin mic
- Ipoteza preferata (Preference Bias)
  - Occam's razor
  - Independenta conditionala maxima
  - Margine maxima
  - Arbore de complexitate redusa
  - Nerest neighbours
  - Recente
    - CNN: spatial bias, group equivariance
    - Deep RL agents – perceptie structurata si rationament relational

Caracteristici importante

- Multimea de antrenare (Training set) -> generalizare
- Multimea de test (Test set)
- Preprocessing
  - Extragere caracteristici (Feature extraction)
  - Reducerea numarului de dimensiuni (Dimensionality reduction)

Regresie – un exemplu

- **Regresie liniara**
- Observam ***v*** si ***t*** valori reale, dorim sa prezicem valori ***t*** pentru valori necunoscute al lui ***x***

$$\mathbf{x} \equiv (x_1, \ldots, x_N)^{\mathrm{T}} \qquad \mathbf{t} \equiv (t_1, \ldots, t_N)^{\mathrm{T}}$$

- Utilizam un set de date sintetice
- Multimea de antrenare N=10 puncte in int [0,1]
- Adaug un zgomot aletor la iesire cf unei distributii Gausiene
- Datele astfel generate – proprietati asemanatoare cu multe seturi de date reale

Regresie – un exemplu

- **Date sintetice**

$$\sin(2\pi x)$$

Model liniar

$$y(x, \mathbf{w}) = w_0 + w_1 x + w_2 x^2 + \ldots + w_M x^M = \sum_{j=0}^{M} w_j x^j$$

- Minimizare functie de eroare

$$E(\mathbf{w}) = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N} \{y(x_n, \mathbf{w}) - t_n\}^2$$

Eroare absoluta

- Solutie w*, polinomul rezultat y(x,w*)
- Ramane problema selectiei lui M

Selectie model

Underfitting

Overfitting

Performanta de generalizare a modelului

Consideram un alt set de test de dimensiune 100

Pentru diferite valori ale lui M putem evalua E(w*) pt datele de antrenare si E(w*) pt datele de test

Utilizam RMS (Root mean square)

$$E_{\mathrm{RMS}} = \sqrt{2E(\mathbf{w}^\star)/N}$$

Performanta de generalizare a modelului

Analizam eroarea pe setul de test, care este o masura a cat de bine prezice modelul valorile lui ***t*** pentru noi date ***x***

Performanta de generalizare a modelului

Analizam valorile coeficientilor w*

	$M=0$	$M=1$	$M=6$	$M=9$
$w_0^\star$	0.19	0.82	0.31	0.35
$w_1^\star$		-1.27	7.99	232.37
$w_2^\star$			-25.43	-5321.83
$w_3^\star$			17.37	48568.31
$w_4^\star$				-231639.30
$w_5^\star$				640042.26
$w_6^\star$				-1061800.52
$w_7^\star$				1042400.18
$w_8^\star$				-557682.99
$w_9^\star$				125201.43

Comportarea modelului in fct de dimensiunea setului de date

Complexitate model vs overfitting

Reducere overfitting

Regularizare

Cea mai simpla formula

$$\widetilde{E}(\mathbf{w}) = \frac{1}{2}\sum_{n=1}^{N}\{y(x_n, \mathbf{w}) - t_n\}^2 + \frac{\lambda}{2}\|\mathbf{w}\|^2$$

$$\|\mathbf{w}\|^2 \equiv \mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{w} = w_0^2 + w_1^2 + \ldots + w_M^2.$$

Efectul regularizarii

Rezultatul pentru M=9 pe acelasi set de date dar utilizand si termen de regularizare

Efectul regularizarii

Cum se modifica parametrii modelului

	$\ln \lambda = -\infty$	$\ln \lambda = -18$	$\ln \lambda = 0$
$w_0^\star$	0.35	0.35	0.13
$w_1^\star$	232.37	4.74	-0.05
$w_2^\star$	-5321.83	-0.77	-0.06
$w_3^\star$	48568.31	-31.97	-0.05
$w_4^\star$	-231639.30	-3.89	-0.03
$w_5^\star$	640042.26	55.28	-0.02
$w_6^\star$	-1061800.52	41.32	-0.01
$w_7^\star$	1042400.18	-45.95	-0.00
$w_8^\star$	-557682.99	-91.53	0.00
$w_9^\star$	125201.43	72.68	0.01

Efectul regularizarii

Impactul termenului de regularizare in functie de lambda

Cross validation

Validare incrucisata – reducere overfitting

- Antrenarea se face pe subseturi de date de învățare și evaluare pe restul
- Metode:
  - Hold out
  - K-fold cross validation
  - Leave-P-out

Recapitulare de la IA

Regresie liniara

$$J(\theta_0, \theta_1, .. \theta_m) = \frac{1}{2n}\sum_{i=1}^{n}(h(x^i) - y^i)^2$$

$$h_\theta(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\theta}^T \mathbf{x}$$

Mean Absolute Error

Regresie logistica

$$h_\theta(x) = \frac{1}{1 + e^{-\theta^T x}}$$

$$J(\theta) = -\frac{1}{2n}\sum_{i=1}^{n} y^i \log(h_\theta(\mathbf{x}^i)) + (1-y^i)\log(1- h_\theta(\mathbf{x}^i))$$

MLE – Maximum Likelihood Estimation

Regresie liniara

Minimizarea functiei de cost $J(\theta_0,\theta_1,.. \theta_m)$

Initializeaza θ_j

repeta pana la convergenta

pentru j=0 la **m** (simultan) **executa**

$$\theta_j \leftarrow \theta_j - \alpha \frac{\partial}{\partial \theta_j} J(\theta_0, \theta_1, .. \theta_m)$$

$$J(\theta_0, \theta_1, .. \theta_m) = \frac{1}{2n} \sum_{i=1}^{n} (h(x^i) - y^i)^2$$

$$h_\theta(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\theta}^T \mathbf{x}$$

Regresie logistica

Initializeaza θ_j

repeta pana la convergenta

pentru j=0 la **m** (simultan) **executa**

$$\theta_j \leftarrow \theta_j - \alpha \frac{\partial}{\partial \theta_j} J(\theta_0, \theta_1, .. \theta_m)$$

$$J(\theta) = -\frac{1}{2n} \sum_{i=1}^{n} y^i \log(h_\theta(\mathbf{x}^i)) + (1-y^i) \log(1- h_\theta(\mathbf{x}^i))$$

$$h_\theta(x) = \frac{1}{1 + e^{-\theta^T x}}$$

Diferente

Regresie liniara

– Distributia este Gausiana

- Valorile prezise sunt continue

Regresie logistica

– Distributia este Bernoulli/Binomiala

- Valorile prezise sunt probabilitati pentru apartenenta (sau non-apartenenta) la o clasa

(Distributie Bernoulli – 1 eveniment cu iesire 1/0

Distributie categoariala – 1 eveniment cu k iesiri

Distributie binomiala – n evenimente cu iesire 1/0

Distributie multinomiala – n evenimente cu k iesiri posibile)

Metrici de performanță

Regresie

- **Mean Absolute Error** (MAE) = media diferenței absolute între valori corecte și valori prezise
- **Root Mean Square Error** (RMSE) = rădăcina pătrată a mediei diferențelor pătratelor între valori corecte și valori prezise

Metrici de performanță pt clasificare

Clasificare

- **Confusion matrix** – corectitudinea și acuratețea modelului

		Actual Values	
		Positive (1)	Negative (0)
Predicted Values	Positive (1)	TP	FP
	Negative (0)	FN	TN

Metrici de performanță pt clasificare

- **Accuracy**– utilă dacă clasele sunt distribuite uniform

$$\text{Accuracy} = \frac{TP + TN}{TP + FP + FN + TN}$$

Metrici de performanță pt clasificare

- **Precision (hit)**

$$\text{Precision} = \frac{TP}{TP + FP}$$

Precision

Metrici de performanță pt clasificare

- **Recall sau Sensitivity (misses)**

$$\text{Recall} = \frac{TP}{TP + FN}$$

Recall or Sensitivity

Classification

Identifying which category an object belongs to.

Applications: Spam detection, image recognition.
Algorithms: SVM, nearest neighbors, random forest, and more...

Examples

Regression

Predicting a continuous-valued attribute associated with an object.

Applications: Drug response, Stock prices.
Algorithms: SVR, nearest neighbors, random forest, and more...

Examples

Clustering

Automatic grouping of similar objects into sets.

Applications: Customer segmentation, Grouping experiment outcomes
Algorithms: k-Means, spectral clustering, mean-shift, and more...

Examples

Dimensionality reduction

Reducing the number of random variables to consider.

Applications: Visualization, Increased efficiency
Algorithms: k-Means, feature selection, non-negative matrix factorization, and more...

Examples

Model selection

Comparing, validating and choosing parameters and models.

Applications: Improved accuracy via parameter tuning
Algorithms: grid search, cross validation, metrics, and more...

Examples

Preprocessing

Feature extraction and normalization.

Applications: Transforming input data such as text for use with machine learning algorithms.
Algorithms: preprocessing, feature extraction, and more...

Examples

scikit-learn

Invatare automata

Universitatea Politehnica Bucuresti

Anul universitar 2021-2022

Adina Magda Florea

Curs Nr. 2

Support Vector Machines

2

1. Clasificatori liniari

- Fiind data o multime de caracteristici din doua clase distincte, se cauta un model pt a le recunoaste
- Problema clasificarii in doua clase folosind modele liniare de forma

$$\mathbf{f(x) = w^T x + b}$$

- Multimea de antrenare este formata din **N** vectori de intrare $\mathbf{x_1}$, .. $\mathbf{x_N}$, cu valorile corespunzatoare $\mathbf{y_1}$, … $\mathbf{y_N}$, unde $\mathbf{y_i} \in \{-1,1\}$
- Noi instante (puncte) **x** sunt clasificate in functie de <u>semnul lui f(x)</u>

Clasificatori liniari

- Consideram un numar de atribute $\mathbf{x} = (x_1 .. x_m)$
- Avem deci N astfel de vectori de intrare

  Ipoteza $f(x) = b + \theta_1 x_1 .. \theta_m x_m$

  $$\mathbf{f(x) = w^T x + b}$$

- Pentru cazul unui singur atribut $f(x) = b + \theta_1 x_1$
- Noi instante (puncte) **x** sunt clasificate in functie de <u>semnul lui f(x)</u>

Clasificatori liniari

$f(x)$ =sign($\mathbf{w}^T\mathbf{x}$ + b), i.e.,

$f(x)$ = 1 daca $\mathbf{w}^T\mathbf{x}$ + b≥0

$f(x)$ = -1 daca $\mathbf{w}^T\mathbf{x}$ + b<0

Hiperplanul de separare clasifica corect daca

$y_i * f(\mathbf{w_i}^T\mathbf{x_i} + b) = 1$ pentru orice ***i*** exemplu de antrenare

2. Support Vector Machines

- Solutia oferita de SVM este:
  - Riguroasa teoretic
  - Eficienta computational
  - Eficienta pentru dimensiuni mari ale spatiului instantelor si multe caracteristici
- Se bazeaza pe teoria invatarii statistice – 1960 Vapnik

Vladimir Vapnik

Separatori liniari

Presupun datele liniar separabile

Cum aleg linia de separare?

Separatori liniari

Presupun datele liniar separabile

Care este cea mai buna linie de separare?

Separatori liniari

Presupun datele liniar separabile

Care este cea mai buna linie de separare?

Marginea de separare

Marginea de separare (marginea de eroare) a unui clasificator liniar = latimea cu care linia de separare poate fi crescuta pana atinge un punct din setul de date (exemple de antrenare)

Dorim o margine de separare cat mai mare

Cum gasim o linie de separare care sa clasifice corect datele si sa produca o margine de separare maxima?

Maximizarea marginii

- Interesul este pentru a maximiza marginea
- **Vectori suport** –cele mai apropiate exemple de linia de separare
- De fapt numai vectorii suport sunt importanti

Marginea clasificatorului

- ***Marginea ρ*** a separatorului este <u>distanta intre vectorii suport</u>.

$\mathbf{w}^T\mathbf{x} + b > \mathbf{0}$

f(x) = 1

$\mathbf{w}^T\mathbf{x} + b = \mathbf{0}$

$\mathbf{w}^T\mathbf{x} + b < \mathbf{0}$

f(x) = -1

$f(\mathbf{x}) = \text{sign}(\mathbf{w}^T\mathbf{x} + b)$

Determinarea marginii

- $\mathbf{f(x) = sign(w^T x + b)}$
  - Doar semnul lui $(\mathbf{w}^T\mathbf{x} + b)$ contează, nu şi valoarea
- Se normalizeaza ecuatiile astfel incat, in limitele care trec prin vectorii suport ai celor doua clase, $\mathbf{w}^T\mathbf{x} + b$ să fie 1, respectiv -1
- Stim ca pentru toate punctele celor doua clase
  - $\mathbf{w}^T\mathbf{x_i} + b \geq 1$ dacă $y_i = 1$
  - $\mathbf{w}^T\mathbf{x_i} + b \leq -1$ dacă $y_i = -1$

Determinarea marginii

Sa ne amintim ca distanta de la un punct (x_0,y_0) la o dreapta ax+by+c=0 este

$$\frac{|ax_0 + by_0 + c|}{\sqrt{a^2 + b^2}}$$

Distanta intre H_0 si H_1 este

$$\frac{|wx + b|}{||w||} = \frac{1}{||w||}$$

La fel intre H_0 si H_2

Deci

$$\boxed{\rho = \frac{2}{\|\mathbf{w}\|}}$$

3. Formularea problemei

1) Clasifica corect datele de antrenare

- Pentru toate punctele celor două clase
  - $\mathbf{w}^T\mathbf{x_i} + b \geq 1$ dacă $y_i = +1$
  - $\mathbf{w}^T\mathbf{x_i} + b \leq -1$ dacă $y_i = -1$

2) Determina W si **b** astfel incat

$$\rho = \frac{2}{\|\mathbf{w}\|}$$ **sa fie maxima pentru toate $\{\mathbf{x_i}\}$**

conditie care poate fi reformulate ca

$$\tfrac{1}{2}\,\mathbf{w}^T\mathbf{w}$$ **sa fie minima pentru toate $\{\mathbf{x_i}\}$**

Problema de optimizare

- Se poate formula o *problema de optimizare:*

Sa se gaseasca $\mathbf{w} \in R^d$ si $\boldsymbol{b} \in R$ a.i.

$\boldsymbol{\Phi}(\mathbf{w}) = ½ \|\mathbf{w}\|^2 = ½\ \mathbf{w}^T\mathbf{w}$ **minima**

cu **restrictia** $y_i\,(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i + b) \geq 1$

$\forall (x_i, y_i),\ i=1..N$

- Necesita **optimizarea unei functii cuadrice cu restrictii liniare** – optimizare cu restrictii (constraint optimization problem)
- Problemele de optimizare cuadrica sunt cunoscute in matematica

Problema de optimizare cu restrictii

Sa se gaseasca $\mathbf{w} \in R^d$ si $\boldsymbol{b} \in R$ a.i.

$\boldsymbol{\Phi}(\mathbf{w}) = ½ \|\mathbf{w}\|^2 = ½\ \mathbf{w}^T\mathbf{w}$ **minima**

cu **restrictia** $y_i\ (\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i + \boldsymbol{b}) \geq \mathbf{1}$

$\forall (x_i, y_i),\ i=1..N$

- Problemele de optimizare cuadrica se rezolva prin <u>metoda multiplicatorilor Lagrange</u>
- Deoarece functia este cuadrica, suprafata este un paraboloid, deci are **un singur minim global**

Intuitie

f: $2x^2+2y^2$, g: $x+y=1$

Gaseste intersectia a 2 functii **f**, **g** intr-un punct de tangenta (derivata 0)

Acest punct va fi min (max) pt **f** a.i. restrictia **g** sa fie satisfacuta

Intuitie

$f: 2x^2+2y^2=0, \quad g: x+y=1$

Gaseste intersectia a 2 functii **f**, **g** intr-un punct de tangenta (derivata 0)

Acest punct va fi min (max) pt **f** a.i. restrictia **g** sa fie satisfacuta

Optimizare cu restrictii

- Avem 2 restrictii:

- restrictia de gradient pe **f** si **g** a.i. solutia sa fie minima sau maxima
- g(x) = 0 (solutia este pe linia restrictiei)
- Cautam o solutie **p** pentru care

$$\nabla f(p) = \nabla g(p), \quad g(x) = 0$$

- Combinam aceste 2 restrictii prin introducerea **multiplicatorilor Lagrange** α

Optimizare cu restrictii

- Pentru o solutie **p**
  - Linia restrictie **g** si linia de contur **f** trebuie sa fie tangente
  - Gradientul lui **g** =0 (perpendicular pe **f**)
  - Gradientul lui **f** trebuie sa fie in aceeasi directie cu **g**
- Cautam o solutie **p** pentru care

$$\nabla f(p) = \nabla g(p), \quad g(x)=0$$

Combinam in L si impunem gradientul lui L sa fie 0

$$L(x,\alpha)=f(x) - \alpha g(x) \quad \text{si} \quad \nabla L(x, \alpha)=0$$

prin introducerea **multiplicatorilor Lagrange** α

Multiplicatori Lagrange

- Pentru cazul general, L este o functie de ***n*** variabile x si ***m*** variabile α_i

$$L(x,\alpha) = f(x) - \Sigma_i \alpha_i g_i(x) \quad \text{cu} \quad \alpha_i \geq 0$$

Gradient pt a minimiza **f**

Conditia restrictiei **g**

SVM

$$L(x,\alpha) = f(x) - \Sigma_i \alpha_i g_i(x) \quad \text{cu} \quad \alpha_i \geq 0$$

- Pentru cazul SVM

$$f(x) = ½ \|\mathbf{w}\|^2$$

$$g(x) = \boldsymbol{y_i} (\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i + \boldsymbol{b}) - \mathbf{1} = \mathbf{0}$$

$$\mathbf{L(w,b,\alpha) = ½ \|w\|^2 - \Sigma_{i=1,N} \alpha_i [y_i (w^T x_i + b) - 1]}$$

pe care trebuie sa o minimizam

Rescris

$$\mathbf{L(w,b,\alpha) = ½ \|w\|^2 - \Sigma_{i=1,N} \alpha_i y_i (w^T x_i + b) + \Sigma_{i=1,N} \alpha_i}$$

Pentru a obtine miniml derivam in raport cu **w** si cu **b**

4. Rezolvarea problemei de optimizare

Sa se gaseasca $\mathbf{w} \in R^d$ si $\boldsymbol{b} \in R$ a.i.

$\mathbf{\Phi(w) = ½ \|w\|^2 = ½\ w^T w}$ **minima**

cu **restrictia** $\boldsymbol{y_i\ (w^T x_i + b) \geq 1}$, $\forall (x_i, y_i)$, i=1..N

- Asociem un **multiplicator Lagrange** $\boldsymbol{\alpha_i}$ fiecarei restrictii cu inegalitate in problema originala

Minimizeaza, in raport cu **w** si **b**

$$\mathbf{L(w,b,\alpha) = ½\ w^T w - \Sigma_{i=1,N}\ \alpha_i\ [y_i\ (w^T\ x_i + b) - 1]}$$

si

$\boldsymbol{\alpha_i \geq 0}$ pentru orice α_i

Rezolvarea problemei de optimizare

Minimizeaza, in raport cu **w** si **b**

$$L(w,b,\alpha) = \tfrac{1}{2}\, w^T w - \Sigma_{i=1,N}\, \alpha_i y_i (w^T x_i + b) + \Sigma_{i=1,N}\, \alpha_i$$

si

$\alpha_i \geq 0$ pentru orice α_i

- $\nabla_w L = w - \Sigma_{i=1,N}\, \alpha_i y_i x_i = 0$ (vector 0)

- $\partial L / \partial b = - \Sigma_{i=1,N}\, \alpha_i y_i = 0$ (scalar)
- Se subtitutie aceste valori in L si se obtine **problema duala**

Problema duala

- Problema duala Lagrangiana = in loc sa minimizam in fct de **w** si **b** , putem maximiza peste $\boldsymbol{\alpha}$ (variabile duale)
- Solutia trebuie sa satisfaca relatiile anterioare

$$\mathbf{w} = \Sigma_{\mathbf{i=1,N}} \alpha_i y_i \mathbf{x}_i \qquad \Sigma_{\mathbf{i=1,N}} \alpha_i y_i = 0$$

Cele mai multe valori $\boldsymbol{\alpha}$ vor avea valori 0.

Valorile diferite de 0 sunt vectorii suport

Rezolvarea problemei de optimizare duale

$$\mathbf{w} = \Sigma_{i=1,N}\, \alpha_i y_i \mathbf{x}_i$$

$$\Sigma_{i=1,N}\, \alpha_i y_i = 0$$

- Subtitutie in L

$$\mathbf{L(w,b,\alpha) = \tfrac{1}{2}w^T w - \Sigma_{i=1,N}\, \alpha_i (y_i (w^T \mathbf{x}_i + b) - 1)}$$

- Rezulta

$$\boxed{\mathbf{L(\alpha) = \Sigma_{i=1,N}\, \alpha_i - \tfrac{1}{2}\, \Sigma_{i=1,N}\, \Sigma_{j=1,N}\, y_i y_j \alpha_i \alpha_j \mathbf{x}^T_i \mathbf{x}_j}}$$

L - functie cuadrica cu argumente vectorul α (α_i)

- Trebuie maximizata **L(α)** in raport cu **α** cu restricţii

Rezolvarea problemei de optimizare duale

Sa se determine $\alpha_1 \ldots \alpha_n$ astfel incat

$$\mathbf{L(\alpha)} = \Sigma \alpha_i - \tfrac{1}{2} \Sigma_i \Sigma_j \alpha_i \alpha_j y_i y_j \mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_j \text{ este maxim}$$

si

(1) $\Sigma \alpha_i y_i = 0,\ i=1,N$

(2) $\alpha_i \geq 0$ pentru orice α_i , $i=1,N$

- O problema de optimizare cu restrictii dar restrictii mai simple
- De obicei exista deja implementata rezolvarea in biblioteci – programare cuadrica/cuadratica
- $\tfrac{1}{2} \Sigma \Sigma \alpha_i \alpha_j y_i y_j \mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_j - \Sigma \alpha_i$ este minim (de obicei minim in biblioteci)

Intrari pentru pachetul de rezolvare

- $\frac{1}{2} \Sigma \Sigma \alpha_i \alpha_j y_i y_j \mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_j - \Sigma \alpha_i$ este minim, α sunt parametrii

Coeficienti cuadratici

$$\min_{\alpha} \frac{1}{2} \alpha^T \begin{pmatrix} y_1y_1\, x_1^Tx_1 & y_1y_2\, x_1^Tx_2 & \ldots\ldots & y_1y_N\, x_1^Tx_N \\ y_2y_1\, x_2^Tx_1 & y_2y_2\, x_2^Tx_2 & \ldots\ldots & y_2y_N\, x_2^Tx_N \\ \ldots\ldots & \ldots\ldots & \ldots\ldots & \ldots\ldots \\ y_Ny_1\, x_N^Tx_1 & y_Ny_2\, x_N^Tx_2 & \ldots\ldots & y_Ny_N\, x_N^Tx_N \end{pmatrix} \alpha + (-1)^T \alpha$$

Termen liniar

(1) $\Sigma \alpha_i y_i = 0$ restrictie liniara

(2) $\alpha_i \geq 0$ pentru orice α_i

$\min_{\alpha} \alpha^T \mathbf{L} \alpha - \mathbf{1}^T \alpha$ cu conditia $\mathbf{y}^T \alpha = \mathbf{0}$ – *restrictie liniara*

$\mathbf{0} \leq \alpha \leq \infty$ - *limite inf si sup*

Solutia problemei de optimizare

- S-a obtinut solutia $\alpha_1 \ldots \alpha_n$ a problemei duale
- Teorema Karush-Kuhn-Tucker – Solutia problemei duale este aceeasi cu cea a problemei initiale
- Cum aflam solutia problemei initiale?

Solutia problemei de optimizare

- Cum aflam solutia problemei initiale?
- Am aratat ca:

a) Calculam **w** si **b**

$$\mathbf{w} = \Sigma_{i=1,N}\, \alpha_i y_i \mathbf{x}_i \qquad \Sigma_{i=1,N}\, \alpha_i y_i = 0$$

Scriem Conditia Karush-Kuhn-Tucker

- $\boxed{\alpha_i (y_i (w^T \mathbf{x}_i + \mathbf{b}) - 1) = 0,\ i=1,N}$ (conditia KKT)
- Fiecare valoare diferita de zero pentru α_i indica faptul ca $\mathbf{x}_i$ este un **vector suport**
- $\alpha_i > 0 \rightarrow \mathbf{x}_i$ **vectori suport (pe margine)**
- $\alpha_i = 0 \rightarrow \mathbf{x}_i$ **puncte interioare**

Solutia problemei de optimizare

$$\mathbf{w} = \Sigma_{\text{i=vectori suport}}\, \alpha_i y_i \mathbf{x}_i$$

- **Gaseste b folosind oricare din vectorii suport**

$$\alpha_i \underline{(y_i (w^T \mathbf{x}_i + \mathbf{b}) - 1)} = 0 \quad \text{(conditia KKT)}$$

$\alpha_i > \mathbf{0}$ pentru vectorii suport

$$y_i (\Sigma_{\text{i=vectori suport}}\, \alpha_i y_i \mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_i + \mathbf{b}) = 1$$

- **Avem w si b deci putem calcula $\underline{\mathbf{w}^T\mathbf{x} + b}$**

Solutia problemei de optimizare

b) Calculam **functia**

- **Alternativ, nu mai calculam w ci calculam direct functia de clasificare**

$\underline{\mathbf{w}^T\mathbf{x} + b}$

- Functia de clasificare este

$$\boxed{f(\mathbf{x}) = \Sigma \alpha_i y_i \mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_k + b}$$

cu b din $y_i\,(\Sigma_{\text{i=vectori suport}}\ \alpha_i y_i\, \mathbf{x}_i^T\, \mathbf{x}_i + \mathbf{b}) = 1$

- Calculul se bazeaza pe produsul scalar intre instanta care se clasifica $\mathbf{x}_k$ si vectorii suport $\mathbf{x}_i$
- Rezolvarea problemei de optimizare implica calculul a $\mathbf{x}_i^T\mathbf{x}_j$ intre toate exemplele de invatare pentru determinarea lui b.

Observatii

$$L(\alpha) = \Sigma \alpha_i - \tfrac{1}{2} \Sigma_i \Sigma_j \alpha_i \alpha_j y_i y_j x_i^T x_j$$

$$\Sigma \alpha_i y_i = 0, \; i=1,N$$

$\alpha_i \geq 0$ pentru orice α_i , $i=1,N$

Daca $\alpha_i > 0$ atunci vectori support

Cazul 1 - x_i si x_j complet diferiti

Cazul 2 - x_i si x_j– complet similari

5. Clasificarea cu margine soft

- Ce se intampla daca un numar mic de exemple nu sunt liniar separabile (probabil zgomot)?
- Se pot adauga *variablile de relaxare* (*Slack*) $\boldsymbol{\varepsilon}_i$ care sa permita tratarea exemplelor particulare, rezultand o margine "*soft*".

Clasificarea cu margine soft

- Problema de optimizare initiala:

Sa se gaseasca $\mathbf{w} \in R^d$ si $\boldsymbol{b} \in R$ a.i.

$\mathbf{\Phi(w) = ½ \|w\|^2 = ½\ w^T w}$ **minima**

cu **restrictia** $\boldsymbol{y_i\ (w^T x_i + b) \geq 1}$, $\forall (x_i, y_i)$, i=1..N

- Se modifica pentru a include variabilele "slack"

Sa se gaseasca $\mathbf{w} \in R^d$ si $\boldsymbol{b} \in R$ a.i.

$\mathbf{\Phi(w) = ½\ w^T w + C\Sigma \varepsilon_i}$ este minimizat

cu **restrictia** $\boldsymbol{y_i\ (w^T x_i + b) \geq 1 - \varepsilon_i}$, $\varepsilon_i \geq 0$, $\forall (x_i, y_i)$, i=1..N

- Parametrul C poate fi vazut ca o modalitate de a controla overfitting-ul: indica cat de importanta este maximizarea marginii versus acoperirea exemplelor de invatare .

Clasificarea cu margine soft

- Problema duala este identica cu cazul separabil (adaugarea variabilelor de relaxare nu apare in obiectivul primar):

Sa se determine $\boldsymbol{\alpha_1 \ldots \alpha_n}$ astfel incat

$$\mathbf{L}(\boldsymbol{\alpha}) = \Sigma\alpha_i - \tfrac{1}{2}\,\Sigma\,\Sigma\,\boldsymbol{\alpha_i}\,\boldsymbol{\alpha_j}\,y_i\,y_j\,\mathbf{x}_i^{\mathbf{T}}\mathbf{x}_j \text{ este maxim si}$$

(1) $\Sigma\boldsymbol{\alpha_i} y_i = 0$

(2) $\boldsymbol{\alpha_i} \geq 0$ pentru orice α_i

- $\mathbf{x}_i$ cu $\alpha_i \neq 0$ vor fi vectorii suport
- Solutia problemei duale este:

$$\mathbf{w} = \Sigma\alpha_i y_i \mathbf{x}_i$$

$$y_i\,(\Sigma_{\mathbf{i=vectori\ suport}}\ \boldsymbol{\alpha_i}\,y_i\,\mathbf{x}_i^{\,T}\,\mathbf{x}_i + \mathbf{b}) = \mathbf{1} - \boldsymbol{\varepsilon_i}$$

Nu avem nevoie sa calculam **w** pentru clasificare

$$f(\mathbf{x}) = \Sigma\alpha_i y_i \mathbf{x}_i^{\mathbf{T}}\mathbf{x} + b$$

SVM liniar: Sinteza

- Clasificatorul este un *hiperplan separator*
- Cele mai importante exemple sunt cele care corespund vectorilor suport – ei definesc hiperplanul.
- Algoritmii de optimizare cuadrica pot identifica puncte de antrenare $\mathbf{x}_i$ cu multiplicatori Lagrange diferiti de zero, α_i
- Atat in problema duala cat si in solutie, punctele de antrenare apar numai in produse scalare

Se determina $\alpha_1 \ldots \alpha_N$ a.i.

$\mathbf{L}(\boldsymbol{\alpha}) = \Sigma\alpha_i - ½\, \Sigma\Sigma\alpha_i\alpha_j y_i y_j \mathbf{x}_i^{\mathbf{T}}\mathbf{x}_j$ este maxim si

(1) $\Sigma\alpha_i y_i = 0$

(2) $0 \leq \alpha_i \leq C$ for all α_i

$f(\mathbf{x}) = \Sigma\alpha_i y_i \mathbf{x}_i^{\mathbf{T}}\mathbf{x} + b$

6. SVM neliniar

- Daca exemplele de invatare sunt separabile liniar sau au putine puncte neseparabile, metoda este buna

- Dar daca nu sunt liniar seprabile?

- Transformare intr-un spatiu superior

SVM neliniar

- Ideea de baza: spatiul de caracteristici initial poate fi transformat intr-un spatiu de ordin superior in care multimea de invatare este separabila (“Kernel trick”)

SVM neliniar

- Se transforma spatiul **X** ($\mathbf{x}_i$) intr-un spatiu de dimensiune superioara **Z** pentru a face clasele separabile

  Spatiul de intrare X: spatiul in care este $\mathbf{x}_i$

  Spatiul de caracteristici Z: spatiul dupa transformare, $\mathbf{x}_i$ corespunde cu $\varphi(\mathbf{x}_i)$

- De ce sa transformam?
  - Operatiile liniare in spatiul de caracteristici sunt echivalente cu operatii neliniare in spatiul de intrare
  - Sarcina de clasificare poate fi mai usoara cu o transformare adecvata.

SVM neliniar

Daca exemplele devin liniar separabile in Z putem utiliza SVM liniar

X

Z

SVM neliniar

Daca exemplele devin liniar separabile in Z putem utiliza SVM liniar

$X = (x_1)$

$Z = (x_1, x_2)$

X

Z

SVM neliniar

$X = (x_1, x_2)$

$Z = (x_1, x_2, x_1x_2)$

X

Z

Transformari neliniare

- Lucram cu Z in loc de X

  $\mathbf{L(\alpha) = \Sigma \alpha_i - ½\, \Sigma_i\, \Sigma_j\, \alpha_i\, \alpha_j\, y_i y_j\, \boxed{\mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_j}}$ este maxima

  α_i nu sunt influentati

  In Z inlocuiesc $\mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_j$ cu $\mathbf{z}_i^T \mathbf{z}_j$

  Presupunem ca Z are dimensiune 10.000 (cu X avand 2 dimensiuni)

  Nr de α_i nu se schimba – dificultatea gasirii α_i nu se modifica

  Vom avea vectori suport in spatiul Z (pt α_i pozitivi)

Interpretare

- Vom avea vectori suport in spatiul Z (pt α_i pozitivi) si un plan de separare
- In spatiul X, pre-imagini ale vectorilor suport din Z

Pre-vectorii nu sunt pe margine, distanta lor la curba nu este aceeasi

Metode nucleu (Kernel)

- **Cum rezolvam in Z?**

$$\mathbf{L(\alpha) = \Sigma \alpha_i - \tfrac{1}{2} \Sigma_i \Sigma_j \alpha_i \alpha_j y_i y_j z_i^T z_j}$$

$$\Sigma \alpha_i y_i = 0,\ i=1,N$$

$$\alpha_i \geq 0 \text{ pentru orice } \alpha_i,\ i=1,N$$

Avem nevoie de produsul scalar $\mathbf{z_i^T z_j}$ in Z

- **Cum decidem in Z?**

$$\mathbf{w = \Sigma_{i=vect\ sup} \alpha_i y_i z_i}$$

$$\mathbf{y_i (w^T z_i + b) = 1}$$

$$\mathbf{f(x) = sign(w^T z + b) = \Sigma \alpha_i y_i z_i^T z_i + b}$$

Metode nucleu (Kernel)

- Este nevoie sa se calculeze produsul scalar in Z
- Se poate face fara vizitarea lui Z?
- Fiind dati x_i, x_j, trebuie sa se obtina $\mathbf{z}_i^T\mathbf{z}_j$
- Fie x si x' in X si fie $\mathbf{z}^T\mathbf{z}' = \mathbf{K(x,x')}$ – **Kernel**
- Φ: $\mathbf{x} \rightarrow \varphi(\mathbf{x}) = z$

$$\mathbf{L(\alpha) = \Sigma \alpha_i - ½ \Sigma_i \Sigma_j \alpha_i \alpha_j y_i y_j K(x_i,x_j)}$$

$$\Sigma \alpha_i y_i = 0,\ i=1,N$$

$$\alpha_i \geq 0 \text{ pentru orice } \alpha_i,\ i=1,N$$

Metode nucleu (Kernel)

- SVM liniar se bazeaza pe kernelul

$$K(\mathbf{x}_i,\mathbf{x}_j)=\mathbf{x}_i^{\mathbf{T}}\mathbf{x}_j$$

- Daca fiecare punct este transformat prin

Φ: $\mathbf{x} \rightarrow \varphi(\mathbf{x})$, atunci:

$$K(\mathbf{x}_i,\mathbf{x}_j)= \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x}_i)^{\mathbf{T}}\boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x}_j)$$

- O *functie kernel* este o functie care este echivalenta cu un produs scalar intr-un spatiu de caracteristici.

Metode nucleu (Kernel)

- **Exemplu de Kernel trick**

In spatiul X $x = (x_1, x_2)$

Folosim o transformare polinomiala Φ de ordin 2 pentru Z

$$\mathbf{z = \varphi(x) = (1, x_1, x_2, x_1^2, x_2^2, x_1x_2)}$$

$$\mathbf{K(x,x') = z^T z' = 1 + x_1 x'_1 + x_2 x'_2 + x_1^2 x'^2_1 + x_2^2 x'^2_2 + x_1 x'_1 x_2 x'_2}$$

Exemple de functii Kernel

- Liniara: $K(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)= \mathbf{x}_1^T\mathbf{x}_2$
  - Φ: $\mathbf{x} \rightarrow \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x})$, unde $\boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x})$ este $\mathbf{x}$

- Gaussiana (Radial Basis Function - RBF)

$$K(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2) = \exp\left(-\frac{||x_1 - x_2||^2}{2\sigma^2}\right)$$

RBF in scikit-learn

$$K(x, x') = e^{-\gamma||x-x'||^2} \qquad \gamma = \frac{1}{n\,features * \sigma^2}$$

https://scikit-learn.org/stable/auto_examples/svm/plot_rbf_parameters.html

Exemple de functii Kernel

- Polinomiala la puterea *p*

$$\boldsymbol{K}(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2) = (1+ \mathbf{x}_1^{\mathbf{T}}\mathbf{x}_2)^p$$

$$\boldsymbol{K}(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2) = (\alpha\mathbf{x}_1^{\mathbf{T}}\mathbf{x}_2 + \beta)^p$$

SVM neliniar / Kernel

Problema duala

Se determina $\alpha_1 \ldots \alpha_N$ a.i.
$\mathbf{Q}(\boldsymbol{\alpha}) = \Sigma\alpha_i - \Sigma\Sigma\alpha_i\alpha_j y_i y_j \boldsymbol{K}(\mathbf{x}_i,\mathbf{x}_j)$ este maxim si
(1) $\Sigma\alpha_i y_i = 0$
(2) $0 \leq \alpha_i \leq inf$ for all α_i

Solutia

$$f(\mathbf{x}) = \text{sign}(\Sigma\alpha_i y_i \boldsymbol{K}(\mathbf{x}_i,\mathbf{x}_j) + b) \; pt \; \alpha_i > 0$$

$$\boldsymbol{b} = \boldsymbol{y_i} - \Sigma\alpha_i y_i K(\mathbf{x}_i,\mathbf{x}_j) \; pt \; \alpha_i > 0$$

Aplicatii SVM

Clasificare texte – atribuire automata a categoriei

- Baza de date Reuters
- 21 578 documente si 118 categorii
- Spatiul datelor are dimensiunea 9947, numarul de cuvinte diferite care descriu documentele
- SVM cu kernel liniar mai bun decat alte metode de clasificare (Naive Bayes, retele Bayesiene, k-nearest neighbours) – 92%
- Viteza mare – cam de 4 ori mai rapid

Aplicatii SVM

Bioinformatica – clasificarea esantioanelor biologice folosind profilele genetice

- Predictia functionarii genelor, predictia structurii secundare a proteinelor, etc.

De exemplu

-Determina pozitiile subcelulare ale proteinelor din secvente procariotice

-3 posibile locatii / categorii de locatii: cytoplasmic, periplasmic si extracelular.

- Problema revine la a clasifica vectori de dimensiune 20 in 3 clase

- Acuratetea de predictie pt un SVM cu kernel gausian 93.4%

SVM

- SVM
  - Model formal
  - Proprietati de generalizare puternice
  - Pot lucra cu dimeniuni foarte mari ale multimii de invatare si cu multe caracteristici
  - Overfitting controlat prin marginea soft
  - Nu intordeauna usor de invatat
  - Pot invata functii complexe utilizand Kernel
  - Sensibile la zgomot
- SVM pentru mai multe clase
  - SVM 1 invata Clasa 1 sau diferit
  - SVM 2 invata Clasa 2 sau diferit
  - Etc.

Invatare automata

Universitatea Politehnica Bucuresti

Anul universitar 2021-2022

Adina Magda Florea

Curs Nr. 3

Reţele neurale

- **Reţele neurale - introducere**
- **Reţele neurale artificiale**
- **Reţele perceptron**
- **Reţele backpropagation**

1. Reţele neurale - introducere

- Formate dintr-un număr mare de elemente de prelucrare simple, identice
- Elementele de prelucrare sunt conectate prin legături; fiecare legatura are asociată o pondere ce codifică cunoştinţele retelei neuronale
- Controlul funcţionării este paralel şi distribuit
- Sunt capabile să înveţe prin modificarea ponderilor si, eventual, a structurii retelei

De ce ANN?

- Invata din exemple
- Operare in timp real: odata invatata functioneaza repede şi execută prelucrari in paralel
- Scaleaza bine la un numar mare de exemple si la numar mare de atribute/caracteristici
- Auto-organizare: o RN poate sa-si creeze propria organizare sau reprezentare a informatiei primita pe parcursul invatarii

Scurt istoric

- **1943** - McCulloch, Pitts - model simplu (binary devices with fixed thresholds)
- **1960** - Rosenblatt

  - perceptron - (feed-forward ANN)

  - enunta si demonstreaza teorema de convergenta a perceptronului
- **1960** - Widrow, Hoff - ADALINE (ADAptive LInear Element)- dispozitiv electronic analogic- folosea ca regula de invatare Least-Mean-Squares (LMS)
- **1969** - Minsky, Papert - au demonstrat limitarile perceptronului

Scurt istoric

- **1970** - RN s-au cam abandonat
- **1980** - Cercetari reluate
- **1986** - Hopfield - functia de energie - a pus in evidenta notiunea de memorie ca o multime de atractori dinamici stabili - ***recurrent networks***
- **1986** - Rumelhart - perceptroni multinivel, retele backpropagation (***feed-forward networks***)
- **1988** - Grossberg si Carpenter - algoritmi de rezonanta - retele ART (Adaptive Resonance Theory)
- **1988** - Anderson si Kohonen (independent) - tehnici asociative

Scurt istoric

- **1980** – Neocognitron – Fukushima
- **1986/2000** – termenul Deep learning – Rina Dechter, Igor Aizenberg
- **1989** – BP to Deep learning – Yann LeCunn
- **1998** - Imbunatatiri - reţele de convoluţie (de ex LeNet-5)
- **2005** – GPU pt CNN
- **2009** – NVIDIA graphic processors
- **2010-2021** – explozia retelelor neurale adanci (potentata de capacitatea de scalare)

Modelul neuronului uman

Poza de la PENN School of Medicine

Neuronul Purkinje. Structurile ramificate ce pornesc din corpul sferic al celulei sunt dendrite. Culorile reprezinta potentialul membranei (sus)si concentratia ionilor de calciu (jos) in timpul propagarii semnalului prin dendrite.

Modelul neuronului uman

Creierul are aprox. 10^{10} neuroni. 1 neuron primeste intrari de la 10^5 sinapse $\rightarrow$ 10^{16} sinapse

Componentele unui neuron

Sinapse

Reţele neurale artificiale (Artificial Neural Networks)

- Modelul neuronului artificial: McCulloch, Pitts (1943) au propus un model simplu al neuronului, cu intrari binare

Modelul neuronului artificial

$$f(x) = \begin{cases} 1 \text{ - daca } x \geq 0 \\ 0/-1 \text{ - in caz contrar} \end{cases}$$

- **$y = f(\Sigma_{i=1,n} w_i x_i - \theta)$**
- w_i reprezinta intensitatea legaturii (conexiunii) de la intrarea x_i care poate fi vazută ca o conexiune cu un neuron
- Daca $f > 0 \rightarrow$ excitare
- Daca $f < 0 \rightarrow$ inhibare
- Daca $f = 0 \rightarrow$ nu exista sinapsa intre neuroni
- θ - valoarea de prag peste care neuronul se activeaza

Caracteristici ANN

- **Tipul de invatare:** supervizat, nesupervizat
- **Topologia retelei**
- **Numarul de straturi sau niveluri**
- **Sensul de propagare a semnalelor**
  - **Feed-forward networks** - un singur sens
  - **Recurrent networks** – conexiuni ciclice (numite retele recurente)
- **Tipul intrarilor si al iesirilor**: intreg, real
- **Regulile de actualizare a ponderilor (invatare)**
- **Tipul functiei de transfer (activare)**

Exemple

N Intrari

M Iesiri

Multi-layer network

Recurrent network

Invatare supervizata

- Fiind date N exemple de invatare

$$\{\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{y}_i\}_{i=1}^{N}$$

- Se alege o **functie de decizie** $\hat{\boldsymbol{y}} = f_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{x}_i)$

si o **functie de eroare** (loss function)

$$J(\hat{\boldsymbol{y}}, \boldsymbol{y}_i) \in \mathbb{R}$$

- Sa se determine **parametrii modelului** a.i. sa se **minimizeze valoarea erorii**

$$\boldsymbol{\theta}^* = \arg\min_{\boldsymbol{\theta}} \sum_{i=1}^{N} J(f_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{x}_i), \boldsymbol{y}_i)$$

Functia de decizie

- **Functia <u>treapta</u> sau limitator** – de ex la perceptron

f(z) =1 daca z>=0, -1 in caz contrar

Sau

f(z) =1 daca z>=0, 0 in caz contrar

Nu este prea buna deoarece nu este derivabila

Functia de decizie

- **Functie de decizie liniara - regresie liniara**

$h(x) = \theta_0 + \theta_1 x_1 .. \theta_n x_n$

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_0 \\ .. \\ x_n \end{bmatrix} \qquad \boldsymbol{\theta} = \begin{bmatrix} \theta_0 \\ .. \\ \theta_n \end{bmatrix}$$

$$h(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\theta}^T \mathbf{x}$$

Fig: Linear Activation Function

- Notam $\theta_1 .. \theta_n$ cu $w_1 .. w_n$ si θ_0 cu θ sau b

$$\hat{\boldsymbol{y}} = f\ (\boldsymbol{x}_i) = \mathrm{w}^{\mathrm{T}}\mathrm{x} + \mathrm{b}$$

Functia de decizie

- **Functie de decizie sigmoid – regresie logistica**

$\sigma(z)$

z

$$\sigma(z) = 1 / (1 + e^{-z})$$

- $\hat{y} = \sigma (w^T x + b)$
- Daca z este foarte mare σ(z) este aproape de 1
- Daca z este f mic σ(z) este aproape de 0

Functia de decizie

- **Functie de decizie tangenta hiperbolica – regresie logistica**

$$\tanh(z) = (e^{z} - e^{-z}) / (e^{z} + e^{-z})$$

- $\hat{y} = \tanh(w^{T}x + b)$

Functia de decizie

- **Functie de decizie <u>ReLU</u> (Rectified Linear Unit)**

sigmoid

$$r(z) = \max(0,z)$$

$$\text{cu } z = \hat{y} = r\,(w^T x + b)$$

Functia de decizie

- **Functie de decizie Leaky ReLU (Leaky Rectified Linear Unit)**

ReLU

Leaky ReLU

$$\mathbf{r}(y) = \max(0, y)$$

$$\mathbf{lr}(y) = \begin{cases} y & \text{daca } y>0 \\ a*y & \text{in caz contrar} \end{cases}$$

Functia de eroare - MSE

- **Eroarea patratica medie** $J(\hat{\boldsymbol{y}}, \boldsymbol{y}_i) \in \mathbb{R}$

(Mean Squared Error)

$$J(\hat{y}, y_i) = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(h(x^i) - y^i)^2$$

cu ***h*** functia de decizie, m –numarul de exmple

Functia de eroare – Logistic loss

- **Cross Entropy** (co-entropia) – masoara diferenta intre 2 distributii de probabilitate ***p*** si ***q***
- Pentru distributii de probabilitate discrete

$$\mathbf{CE(p,q) = -\Sigma_x(p(x)\log q(x))}$$

- Pentru probleme de clasificare cu C clase – **Cross entropy loss**

$$CE(y,f) = -\sum_{j=1}^{C} y_j \log\left(f\left(x_j, w\right)\right)$$

Functia de eroare – Logistic loss

- Pentru probleme de clasificare in care C=2

$$CE(y, f) = -y \log\big(f(x, w)\big) - (1 - y)\log\,(1 - f(x, w))$$

- Functia de eroare se calculeaza prin media erorilor din toate cele *m* exemple de invatare

$$J(\hat{y}, y_i) = -1/(m) * \Sigma_{i=1,m} [y^i \log\hat{y}^i + (1-y^i) \log(1-\hat{y}^i)]$$

Binomial Logistic Loss/Regression sau **Logistic Loss or log loss**

Functia de eroare – Softmax loss

Softmax loss

(Multinomial Logistic Loss/Regression)

- Este o functie de clasificare Softmax combinate cu Cross entropy loss
- Iesirea retelei este interpretata ca o distributie de probabilitate peste cele C (k) clase
- Pentru a transforma scorurile intr-o distributie de probabilitate se aplica exponent si se normalizeaza

Softmax classifier

$$P(Y = k|X = x_i) = \frac{e^{s_k}}{\sum_j e^{s_j}}$$

unde $s = f(x_i, w)$

Functia de eroare – Softmax loss

$$P(Y = k|X = x_i) = \frac{e^{s_k}}{\sum_j e^{s_j}}$$

$$CE(y, f) = -\sum_{j=1}^{C} y_j \log\left(f\left(x_j, w\right)\right)$$

In cazul unei clasificari multi-clasa se retin numai clasele. Exista un singur element care este diferit de 0 deci se elimina celelate elemente din suma (y_j=0)

$$L_i(f(x_i, w), y_i) = -logP(Y = y_i|X = x_i) = -\log\left(\frac{e^{s_{yi}}}{\sum_j e^{s_j}}\right)$$

$$J(\hat{y}, y_i) = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} L_i(f(x_i, w), y_i)$$

2. Reţele Perceptron

- Rosenblatt [1962] – perceptron "clasic"
- Model actualizat de Minsky si Papert
- N intr. binare
- M exemple la intrari $\mathbf{x}^i_1,\ldots\mathbf{x}^i_N$, i=1,M
- Iesiri $\hat{\boldsymbol{y}}^s$ = +1/0 (sau+1/-1) – il notam cu **y**
- Functia treapta (limitator)
- $\mathbf{y}^i$ il notam cu $\mathbf{d}^i$ – iesiri dorite pt i = 1,M

(a) Reprezentare perceptron

(b) Reprezentare perceptron cu intrare fictiva x_0

• Perceptron = Unitate computationala cu valoare de prag θ care pentru intrari $x_1,..x_n$ si ponderi $w_1 \ldots w_n$ produce la iesire +1 daca $\Sigma_{k=1,N}\ w_k x_k \geq \theta$ si 0 (sau -1) in caz contrar

• Separa spatiul intrarilor in 2 zone: pct pt care rezultatul este 1 si pct pt care rezultatul este 0

Exemplu: perceptron cu 2 intrari reale, iesiri 0/1, f. treapta

$$y = f_h\left(\sum_{i=1}^{N} w_i x_i - \theta\right)$$

$$y = f_h\left(\sum_{i=0}^{N} w_i x_i\right)$$

Exemplu: **SAU** logic, intrari 0/1, iesiri 0/1, f. treapta

Caracteristici

- Minsky si Papert [1969] au pus in evidenta limitarile modelului computational al perceptronilor

- ***Functiile calculabile de perceptron*** – acele functii pentru care punctele cu valoarea functiei 1 ($\in$A) pot fi separate de punctele cu valoarea functiei 0 ($\in$ B) – **liniar separabile**

- Nu orice functie este calculabila de perceptron
- De exemplu AND si OR pot fi calculate

- XOR nu poate fi calculat

$x_1=0\ x_2=0\quad w_1x_1+w_2x_2 = 0 \quad \Rightarrow 0 < \theta$

$x_1=1\ x_2=0\quad w_1x_1+w_2x_2 = w_1 \quad \Rightarrow w_1 \geq \theta$

$x_1=0\ x_2=1\quad w_1x_1+w_2x_2 = w_2 \quad \Rightarrow w_2 \geq \theta$

$x_1=1\ x_2=1\quad w_1x_1+w_2x_2 = w_1+w_2 \quad \Rightarrow w_1+w_2 < \theta$

$$y = f_h\left(\sum_{i=1}^{N} w_i x_i - \theta\right)$$

- Calculul facut de perceptron poate fi vazut ca o ***separare liniara a spatiului de intrare*** dar si ca o ***cautare in spatiul ponderilor***
- Perceptron cu **n** intrari – gaseste **n+1** parametrii – reprezinta un punct in spatiul cu **n+1** dimensiuni al ponderilor
- Fiecare punct in spatiul **n+1** al ponderilor poate fi asociat cu un hiperplan in spatiul intrarilor de dimensiune **n+1**
- ***Dualitate intrari - ponderi***

Functionare perceptron

- 2 etape ale functionarii

Algoritmul de invatare al perceptronului

1. Initializeaza ponderile $\mathbf{w_k}$ (k- nr intrari) si valoarea de prag θ cu valori aleatoare mici ([-0.1, +0.1]
2. Prezinta cele M exemple. Fie **y(0)** iesirea perceptronului la momentul de timp 0
3. **daca** toate exemplele sunt clasificate corect

   atunci STOP /* perceptronul a invatat */
4. Actualizeaza ponderile si valoarea de prag

   pentru fiecare exemplu i=1,M **repeta**

   4.1.Calculeaza iesirea perceptronului

$$\mathbf{y^i(t) = f(\Sigma_{k=0,N}\, w_k(t) x^i_k)}$$

   4.2.Actualizeaza ponderile $\mathbf{w_k}$ la momentul de timp t + 1, k=0,N

$$\mathbf{w_k(t+1) = w_k(t) - \underbrace{\alpha\,(d^i - y^i)\, x^i_k}_{(\Delta w_k \text{ – delta rule})}}$$

5. repeta de la 3

sfarsit

Justificarea actualizarii ponderilor

- Functia de eroare MSE

$$\text{Eroare} = \tfrac{1}{2} \sum_i (d^i - y^i)^2$$

- Dorim un minim global pentru E(w) =0
- ***Metoda scaderii gradientului***

Justificarea actualizarii ponderilor

- Actualizarea ponderilor se bazeaza pe **scaderea gradientului**: schimbarea fiecarui w_k cu o cantitate Δw_k proportionala cu gradientul **functiei de eroare** (***masura a erorii***) pentru un anumit punct
- $\mathbf{w_k(t+1) = w_k(t) - \alpha\,(d^i - y^i)\,x^i_k}$
- $\mathbf{\Delta w_k = \alpha\,(d^i - y^i)\,x^i_k = \alpha\,\delta_i\,x^i_k}$

- Eroare = $\frac{1}{2} \sum_i (d^i - y^i)^2$

Justificarea actualizarii ponderilor

- Eroare = ½ $\sum_i (d^i - y^i)^2$
- Modificare eroare in fct de iesire

$$\partial \text{Eroare} / \partial y^i = \partial[1/2 \sum_i (d^i - y^i)^2] / \partial y^i =$$
$$\partial[1/2 (d^i - y^i)^2] / \partial y^i = -(d^i - y^i)$$

- Modificare eroare in fct de ponderi

$$\partial \text{Eroare} / \partial w_k = \partial \text{Eroare} / \partial y^i * \partial y^i / \partial w_k =$$
$$-(d^i - y^i) * \partial y^i / \partial w_k = -(d^i - y^i) * \partial (\Sigma_{k=0,N} w_k x^i_k) / \partial w_k$$
$$= -(d^i - y^i) * x^i_k$$

Delta rule la perceptron

$$w_k(t+1) = w_k(t) - \alpha(d^i - y^i) x^i_k = w_k(t) - \alpha\, \delta_i\, x^i_k$$

cu $\alpha = 1$

3. Retele backpropagation

- **Perceptronii multi-nivel sau retele backpropagation**
- **Sunt retele neuronale cu activare directa care contin unul sau mai multe straturi de noduri intre nodurile de intrare si nodurile de iesire.**
- **Aceste straturi suplimentare reprezinta nivelele ascunse ale perceptronilor multinivel.**

Perceptroni multi-nivel cu doua niveluri si un strat ascuns

Caracteristici

- 2 etape ale functionarii
- functie sigmoid
- intrari binare sau reale in intervalul [0, 1] sau [-1, +1]

$$h_j = f\left(\sum_{i=1}^{A} w_{1ij} x_i - \theta_{1j}\right), \quad j = 1, B$$

$$\text{iesire} = \frac{1}{1 + e^{-\text{suma intrari}}}$$

$$y_j = f\left(\sum_{i=1}^{B} w_{2ij} h_i - \theta_{2j}\right), \quad j = 1, C$$

Functionare

Algoritmul de invatare al retelelor backpropagation este format din doi pasi principali:

(a) o parcurgere directa a retelei, de la intrari la iesiri, in care se activeaza reteaua si se determina valorile iesirilor

(b) o parcurgere inapoi a retelei, de la iesiri la intrari, in care iesirile calculate se compara cu iesirile din exemple si se determina o estimare a erorii; aceasta estimare a erorii este propagata inapoi si utilizata la actualizarea ponderilor.

epoca

Functionare - cont

Notatii algoritm

α este factorul de scalare care reprezinta viteza de invatare

$d_j,\ j = 1, C$ reprezinta valorile iesirilor din exemple, cate o secventa pentru fiecare exemplu

$\delta_{2j},\ j = 1, C$ reprezinta estimarea erorilor la nivelul stratului de iesire

$\delta_{1j},\ j = 1, B$ reprezinta estimarea erorilor la nivelul stratului ascuns.

Algoritmul de invatare backpropagation

1 . Initializeaza ponderile si valorile de prag cu valori aleatoare mici in intervalul [-0.1, 0.1]

$$w_{1ij} \leftarrow \text{aleator}(-0.1,\ 0.1) \quad i = 0, A, \quad j = 1, B$$

$$w_{2ij} \leftarrow \text{aleator}(-0.1,\ 0.1) \quad i = 0, B, \quad j = 1, C$$

2. **pentru** fiecare exemplu **executa**

2.1. Calculeaza iesirea retelei

$$h_j \leftarrow f\left(\sum_{i=0}^{A} w_{1ij} \cdot x_i\right) \quad j = 1, B$$

$$y_j \leftarrow f\left(\sum_{i=0}^{B} w_{2ij} \cdot h_i\right) \quad j = 1, C$$

cu *f* functia sigmoid

2.2. Calculeaza erorile la nivelul stratului de iesire

$$\delta_{2j} \leftarrow y_j(1 - y_j)(d_j - y_j) \quad j=1,C$$

Algoritmul de invatare backpropagation - cont

2.3. Calculeaza erorile la nivelul stratului ascuns

$$\delta_{1j} \leftarrow h_j(1-h_j)\sum_{i=1}^{C}\delta_{2i}\, w_{2ij} \quad j=1,B$$

2.4. Modifica ponderile

$$w_{1ij}(t+1) \leftarrow w_{1ij}(t) - \alpha\, \delta_{1j}\, x_i, \quad i=0,A,\ j=1,B$$

$$w_{2ij}(t+1) \leftarrow w_{2ij}(t) - \alpha\, \delta_{2j}\, h_i, \quad i=0,B,\ j=1,C$$

3. **repeta** pasul 2 de cate ori se doreste

sfarsit

α– viteza de invatare

Observatii

1) **Actualizarea ponderilor se face cf. metodei *scaderii gradientului***

2) **Reducere overfitting**

- Regularizare – vezi Curs 1
- Reducere nr atribute

3) **Validare incrucisata** – vezi Curs 1

4) **Optimal brain damage** = incepe cu o retea total conectata si elimina pe rand conexiuni – utilizeaza metode din teoria informatiei pt a determina ce conexiuni sa elimine

5) **Tiling** – creste succesiv numarul de neuroni de pe stratul ascuns

Exemple retele cu ponderi calculate

- **SAU EXCLUSIV** – backprop, intrari 0, 1,
- f. limitator

Retea care selecteaza maximum a doua intrari reale

- $f_3(t) = t$

- f_1 functie de transfer treapta

- $f_2(t) = \begin{cases} t & \text{daca } t \geq 0 \\ -t & \text{daca } t < 0 \end{cases}$

Regiuni de decizie

- 0 straturi ascunse: clasificator liniar
  - Hiperplane

Regiuni de decizie

- 1 strat ascuns
  - Regiuni convexe (deschise sau inchise closed)

Regiuni de decizie

- 2 straturi ascunse
  - Combinare de regiuni convexe

Retele adanci

Cresterea numarului de straturi/niveluri

Retele adanci

Invatare automata

Universitatea Politehnica Bucuresti

Anul universitar 2021-2022

Adina Magda Florea

Curs Nr. 4

Reţele neurale adanci feedforward

- **Regresie logistica in retea**
- **Functia de activare**
- **Vectorizare**
- **Forward si backward propagation cu vectorizare pentru 2 straturi**
- **Forward si backward propagation cu vectorizare pentru L straturi (deep)**
- **Hiperparametii**

Regresie logistica

- **Logistic loss**

$$J(\hat{y}, y_i) = -1/(m) * \Sigma_{i=1,m} [y^i \log\hat{y}^i + (1-y^i) \log(1-\hat{y}^i)]$$

In cele ce urmeaza vom folosi notatia **a** pt $\hat{\mathbf{y}}$ (iesirea calculata a retelei) si **y** pt iesirea corecta (iesirea dorita a retelei)

Regresie logistica in retea

- Folosim **logistic loss**, functia de decizie **sigmoid** si **scaderea gradientului** (gradient descent)

$$z = w^T x + b$$

$$a = \sigma(z)$$

$\sigma(z) = 1 / (1 + e^{-z})$

Regresie logistica in retea

- Derivare **logistic loss** si **sigmoid**

J(a,y) = y log a + (1-y) log(1-a)

$$\frac{dJ(a,y)}{da} = -\frac{y}{a} + \frac{1-y}{1-a}$$

$\sigma(z) = 1 / (1 + e^{-z})$ **a= σ(z) - sigmoid**

$$\frac{da}{dz} = a(1-a)$$

$$\frac{\partial f(x)}{\partial x} = \frac{\partial f}{\partial x}[\frac{1}{1+e^{-x}}] = (1+e^{-x})^{-2} * e^{-x} = f(x) * (1 - f(x))$$

Regresie logistica pt *1* exemplu

- Folosim **logistic loss**, functia de decizie **sigmoid** si **scaderea gradientului**

x_1, w_1

x_2, w_2

x_n, w_n

b

$$z = \sum_{i=1}^{n} w_i x_i + b$$

a= σ(z)

***J*(a, y)**

da $$\frac{dJ(a,y)}{da} = -\frac{y}{a} + \frac{1-y}{1-a}$$

dz $$\frac{dJ(a,y)}{dz} = \frac{dJ(a,y)}{da}\frac{da}{dz} = \left(-\frac{y}{a} + \frac{1-y}{1-a}\right) a(1-a) = a - y$$

$$\frac{dJ(a,y)}{dw_i} = x_i dz$$ ***dw_i***

db= dz

$$w_i \leftarrow w_i - \alpha\, dw_i$$

$$b \leftarrow b - \alpha\, db$$

Regresie logistica pt *m* exemple

$$J(a^i, y^i) = -1/(m) * [\Sigma_{i=1,m}\, y^i \log(a^i) + (1-y^i) \log(1-a^i)]$$

Notatii:

- (i) indice sus (superscript) - exemplul (i=1,m)
- k indice jos (subscript) - neuronul/atributul din ex (k=1,n)
- [l] indice sus – nivelul neuronilor (L=0, 1, …)

Regresie logistica pt *m* exemple

- **1 epoca**

$J = 0 \quad dw_k=0\ (k=1\ldots n) \quad db=0$

for i=1 **to** m **do**

$z^{(i)} = w^T x^{(i)} + b, \quad a^{(i)} = \sigma(z^{(i)})$

$J = J - [y^{(i)} \log a^{(i)} + (1-y^{(i)}) \log(1-a^{(i)})]$

$dz^{(i)} = a^{(i)} - y^{(i)}$

for k=1 **to** n **do**

$dw_k = dw_k + x_k^{(i)} dz^{(i)}$

$db = db + dz^{(i)}$

x_1, w_1

x_2, w_2

x_n, w_n

b

$\boldsymbol{J}(\mathbf{a}, \mathbf{y})$

$J = J/m \quad dw_k = dw_k/m\ (k=1\ldots n) \quad db = db/m$

- **Actualizare ponderi si valoare de prag**

$w_k = w_k - \alpha\, dw_k\ (k=1\ldots n) \qquad b = b - \alpha\, db$

Retea cu mai multe straturi

- **2 bucle for (dupa m si dupa n)**
- **Vectorizare**
- **Importanta daca am multe straturi**

Retea cu mai multe straturi

Functia de activare pt retea cu L straturi

Sigmoid

$$a^{[1]} = \sigma(z^{[1]})$$
$$a^{[2]} = \sigma(z^{[2]})$$

$\sigma(z)$

z

$$\sigma(z) = 1 / (1 + e^{-z})$$
$$z = w^T x + b$$

Functia de activare

Tangenta hiperbolica

$$a^{[1]} = \tanh(z^{[1]})$$
$$a^{[2]} = \sigma(z^{[2]})$$

tanh(z)

$$\tanh(z) = (e^{z} - e^{-z}) / (e^{z} + e^{-z})$$

z

Functia de activare

sigmoid/tanh

ReLU

ReLU/Leaky ReLU

$$a^{[1]} = \sigma(z^{[1]})$$
$$a^{[2]} = r(z^{[2]})$$

Leaky ReLU

ReLU

$$r(y) = \max(0,y)$$

$$lr(y) = \begin{cases} y & \text{daca } y>0 \\ a*y & \text{in caz contrar} \end{cases}$$

Functia de activare

Softmax

- **Mai multe clase**
- **Softmax** – generalizare sigmoid pentru mai multe clase
- Probabilitatea de a apartine unei clase

$$s(z_c) = \frac{e^{z_c}}{\sum_k e^{z_k}}$$

$$\boldsymbol{z = w^T x + b}$$

Vectorizare pt 1 ex

- Vectorizare: pentru eficienta si utilizarea facilitatilor de prelucrare

$$z_1^{[1]} = w_1^{[1]T} x + b_1^{[1]},\ a_1^{[1]} = \sigma(z_1^{[1]})$$

$$z_2^{[1]} = w_2^{[1]T} x + b_2^{[1]},\ a_2^{[1]} = \sigma(z_2^{[1]})$$

$$z_3^{[1]} = w_3^{[1]T} x + b_3^{[1]},\ a_3^{[1]} = \sigma(z_3^{[1]})$$

$$z_4^{[1]} = w_4^{[1]T} x + b_4^{[1]},\ a_4^{[1]} = \sigma(z_4^{[1]})$$

Vectorizare pt 1 ex

- Vectorizare: pentru eficienta si utilizarea facilitatilor de prelucrare

$$z_1 = [w_{11}\ w_{21}\ w_{31}] \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} + b_1$$

$$\boldsymbol{W} \begin{bmatrix} w_{11} & w_{21} & w_{31} \\ w_{12} & w_{22} & w_{32} \\ w_{13} & w_{23} & w_{33} \\ w_{14} & w_{24} & w_{34} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} w_{11}x_1 + w_{21}x_2 + w_{31}x_3 + b_1 \\ \ldots\ldots\ldots\ldots \\ \\ \end{bmatrix}$$

(4,3) (3,1) (4,1)

Vectorizare pt 1 ex

$$z_1^{[1]} = w_1^{[1]T} x + b_1^{[1]},\ a_1^{[1]} = \sigma(z_1^{[1]})$$

$$z_2^{[1]} = w_2^{[1]T} x + b_2^{[1]},\ a_2^{[1]} = \sigma(z_2^{[1]})$$

$$z_3^{[1]} = w_3^{[1]T} x + b_3^{[1]},\ a_3^{[1]} = \sigma(z_3^{[1]})$$

$$z_4^{[1]} = w_4^{[1]T} x + b_4^{[1]},\ a_4^{[1]} = \sigma(z_4^{[1]})$$

$n^{[1]}, n^{[0]}$

$$z^{[1]} = W^{[1]} x + b^{[1]}$$

(4,1) (4,3) (3,1) (4,1)

$$z^{[2]} = W^{[2]} a^{[1]} + b^{[2]}$$

(1,1) (1,4) (4,1) (1,1)

$$a^{[1]} = \sigma(z^{[1]})$$

(4,1) (4,1)

$$a^{[2]} = \sigma(z^{[2]})$$

(1,1) (1,1)

Vectorizare pt m exemple

- Pentru eficienta si utilizarea facilitatilor de prelucrare

$$z^{[1]} = W^{[1]}x + b^{[1]}$$
$$a^{[1]} = \sigma(z^{[1]})$$
$$z^{[2]} = W^{[2]}a^{[1]} + b^{[2]}$$
$$a^{[2]} = \sigma(z^{[2]})$$

$$x^{(1)} \longrightarrow a = \hat{y}^{(1)}$$

$$x^{(m)} \longrightarrow a = \hat{y}^{(m)}$$

$$X = \begin{bmatrix} . & . & \dots & . \\ x^{(1)} & x^{(2)} & \dots & x^{(m)} \\ . & . & \dots & . \\ . & . & \dots & . \end{bmatrix}$$

n x m

Vectorizare pt m exemple

$$z^{[1]} = W^{[1]}x + b^{[1]}$$
$$a^{[1]} = \sigma(z^{[1]})$$
$$z^{[2]} = W^{[2]}a^{[1]} + b^{[2]}$$
$$a^{[2]} = \sigma(z^{[2]})$$

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} . & . & \cdots & . \\ x^{(1)} & x^{(2)} & \cdots & x^{(m)} \\ . & . & \cdots & . \\ . & . & \cdots & . \end{bmatrix}$$

$n^{[0]}$ x m

$$\mathbf{Z}^{[1]} = \begin{bmatrix} . & . & \cdots & . \\ z^{[1](1)} & z^{[1](2)} & \cdots & z^{[1](m)} \\ . & . & \cdots & . \\ . & . & \cdots & . \end{bmatrix}$$

$n^{[1]}$ x m

$$\mathbf{A}^{[1]} = \begin{bmatrix} . & . & \cdots & . \\ a^{[1](1)} & a^{[1](2)} & \cdots & a^{[1](m)} \\ . & . & \cdots & . \\ . & . & \cdots & . \end{bmatrix}$$

Vectorizare pt m exemple

$n^{[0]}$ $n^{[1]}$ $n^{[2]}$

```
for i = 1 to m:
```

$$z^{[1](i)} = W^{[1]}x^{(i)} + b^{[1]}$$
$$a^{[1](i)} = \sigma(z^{[1](i)})$$
$$z^{[2](i)} = W^{[2]}a^{[1](i)} + b^{[2]}$$
$$a^{[2](i)} = \sigma(z^{[2](i)})$$

$n^{[1]}$ x m $n^{[0]}$ x m

$$\mathbf{Z^{[1]} = W^{[1]} X + b^{[1]}}$$
$$\mathbf{A^{[1]} = \sigma(Z^{[1]})}$$
$$\mathbf{Z^{[2]} = W^{[2]} A^{[1]} + b^{[2]}}$$
$$\mathbf{A^{[2]} = \sigma(Z^{[2]})}$$

$$z^{[1]} = W^{[1]}x + b^{[1]}$$

(4,1) (4,3) (3,1) (4,1)

activare pt $a^{[1]}$ sigmoid sau tanh
activare pt $a^{[2]}$ ReLU sau Leaky ReLU
Notam $g^{[1]}$ si $g^{[2]}$ in loc de σ

Forward prop pentru 2 straturi cu vectorizare

Forward prop

$Z^{[1]} = W^{[1]} X + b^{[1]}$

$A^{[1]} = g^{[1]}(Z^{[1]})$

$Z^{[2]} = W^{[2]} A^{[1]} + b^{[2]}$

$A^{[2]} = g^{[2]}(Z^{[2]}) = \sigma(Z^{[2]})$

$Y=[y^{(1)}\ y^{(2)}\ \ldots y^{(m)}]$

Retea cu 2 straturi

Backward prop pt L=2 (vezi slide 10)

Backward prop pentru 2 straturi cu vectorizare

Backward prop

$dZ^{[2]} = A^{[2]} - Y$

$\mathbf{dW^{[2]}} = (1/m)\ dZ^{[2]}\ A^{[1]T}$

$\mathbf{db^{[2]}}=(1/m)\ sum_oriz(dZ^{[2]})$ $(n^{[2]},1)$

$dZ^{[1]} = W^{[2]T}\ dZ^{[2]} * g^{[1]'}(Z^{[1]})$

$(n^{[1]},m)$ $(n^{[1]},m)$

$\mathbf{dW^{[1]}} = (1/m)\ dZ^{[1]}\ X^{[T]}$

$\mathbf{db^{[1]}} = (1/m)\ sum_oriz(dZ^{[1]})$ $(n^{[1]},1)$

$dZ^{[2]} = dA^{[2]} * g^{[2]'}(Z^{[2]})$

$\mathbf{dW^{[2]}} = (1/m)\ dZ^{[2]}\ A^{[1]T}$

$\mathbf{db^{[2]}}=(1/m)\ sum_oriz(dZ^{[2]})$

$dA^{[1]}= dW^{[2]T}dZ^{[2]}$

$dZ^{[1]} = dA^{[1]}*g^{[1]'}(Z^{[1]})$

$\mathbf{dW^{[1]}} = (1/m)\ dZ^{[1]}\ X^{[T]}$

$\mathbf{db^{[1]}} = (1/m)\ sum_oriz(dZ^{[1]})$

Forward si backward prop pentru 2 straturi cu vectorizare

Forward prop

$Z^{[1]} = W^{[1]} X + b^{[1]}$

$A^{[1]} = g^{[1]}(Z^{[1]})$

$Z^{[2]} = W^{[2]} A^{[1]} + b^{[2]}$

$A^{[2]} = g^{[2]}(Z^{[2]}) = \sigma(Z^{[2]})$

$Y=[y^{(1)}\ y^{(2)}\ \ldots y^{(m)}]$

Backward prop

$dZ^{[2]} = dA^{[2]} * g^{[2]\prime}(Z^{[2]})$

$dW^{[2]} = (1/m)\ dZ^{[2]}\ A^{[1]T}$

$db^{[2]}=(1/m)\ \mathit{sum_oriz}(dZ^{[2]})$

$dA^{[1]}= dW^{[2]T} dZ^{[2]}$

$dZ^{[1]} = dA^{[1]} * g^{[1]\prime}(Z^{[1]})$

$dW^{[1]} = (1/m)\ dZ^{[1]}\ X^{[T]}$

$db^{[1]} = (1/m)\ \mathit{sum_oriz}(dZ^{[1]})$

Forward pt L straturi cu 1 exemplu vectorizat

Forward prop 1 ex

$z^{[1]} = W^{[1]} x + b^{[1]}$

$a^{[1]} = g^{[1]}(z^{[1]})$

Funct activare (reLU)

……

$z^{[4]} = W^{[4]} a^{[3]} + b^{[4]}$

$a^{[4]} = g^{[4]}(z^{[4]}) = \sigma(z^{[4]})$

Funct activare (sigmoid)

In general, pt **L** straturi

$$\mathbf{z^{[l]} = W^{[l]} a^{[l-1]} + b^{[l]}}$$

$$\mathbf{a^{[l]} = g^{[l]}(z^{[l]})}$$

$l = 1, L$ si $a^{[0]} = x$

Forward pt L straturi *m* exemple vectorizat

$n^{[0]}$ $n^{[1]}$ $n^{[2]}$ $n^{[3]}$ $n^{[L=4]}$

Forward prop m ex

$Z^{[1]} = W^{[1]} X + b^{[1]}$

$A^{[1]} = g^{[1]}(Z^{[1]})$

……

$Z^{[4]} = W^{[4]} A^{[3]} + b^{[4]}$

$A^{[4]} = g^{[4]}(Z^{[4]}) = \sigma(Z^{[4]})$

In general, pt **L** straturi ***m*** exemple

$$\mathbf{Z^{[l]} = W^{[l]} A^{[l-1]} + b^{[l]}}$$

$$\mathbf{A^{[l]} = g^{[l]}(Z^{[l]})}$$

l=1,L si $A^{[0]}$=X

$$Z^{[1]} = \begin{bmatrix} . & . & \cdots & . \\ z^{[1](1)} & z^{[1](2)} & \cdots & z^{[1](m)} \\ . & . & \cdots & . \\ . & . & \cdots & . \end{bmatrix}$$

Forward si backward prop pt L straturi 1 ex

$n^{[0]}$ $n^{[1]}$ $n^{[2]}$ $n^{[3]}$ $n^{[L=4]}$

Forward

Intrare $a^{[l-1]}$

Iesire $a^{[l]}$

Backward

Intrare $da^{[l]}$

Iesire $da^{[l-1]}$

$dW^{[l]}$

$db^{[l]}$

Forward si backard prop pt L straturi 1 ex

Forward

Intrare $a^{[l-1]}$

Iesire $a^{[l]}$

Backward

Intrare $da^{[l]}$

Iesire $da^{[l-1]}$

$dW^{[l]}$

$db^{[l]}$

Forward pt 1 strat *l* si 1 ex

$z^{[l]} = W^{[l]} z^{[l-1]} + b^{[l]}$

$a^{[l]} = g^{[l]}(z^{[l]})$

Forward si backard prop pt L straturi 1 ex

Forward

Intrare $a^{[l-1]}$

Iesire $a^{[l]}$

Backward

Intrare $da^{[l]}$

Iesire $da^{[l-1]}$ $dW^{[l]}$ $db^{[l]}$

l=1,L

Forward

Actualizare ponderi si valoare de prag $W^{[l]} = W^{[l]} - \alpha\, dW^{[l]}$

$b^{[l]} = b^{[l]} - \alpha\, db^{[l]}$

Backward

Forward si backard prop (deep)

Forward pt strat *l* si 1 ex

$z^{[l]} = W^{[l]} z^{[l-1]} + b^{[l]}$

$a^{[l]} = g^{[l]}(z^{[l]})$

Forward propagation

Forward pt strat *l* si *m* ex (vectorizat)

$\mathbf{Z^{[l]} = W^{[l]} Z^{[l-1]} + b^{[l]}}$

$\mathbf{A^{[l]} = g^{[l]}(Z^{[l]})}$

Forward si backard prop (deep)

Backward pt strat *l* si 1 ex

$dz^{[l]} = da^{[l]} * g^{[l]'}(z^{[l]})$

$dW^{[l]} = dz^{[l]}\, a^{[l-1]}$

$db^{[l]} = dz^{[l]}$

$da^{[l-1]} = W^{[l]T}\, dz^{[l-1]}$

Backward propagation

Backward pt strat *l* si *m* ex (vectorizat)

$\mathbf{dZ^{[l]} = dA^{[l]} * g^{[l]'}(Z^{[l]})}$

$\mathbf{dW^{[l]} = (1/m)\, dZ^{[l]}\, A^{[l-1]T}}$

$\mathbf{db^{[l]}=(1/m)\, \mathit{sum_oriz}(dZ^{[l]})}$

$\mathbf{dA^{[l-1]} = W^{[l]T}\, dZ^{[l-1]}}$

Forward si backard prop (deep)

$$da[L] = -\frac{y}{a} + \frac{1-y}{1-a}$$

$$dA^{[L]} = \left(-\frac{y^{(1)}}{a^{(1)}} + \frac{1-y^{(1)}}{1-a^{(1)}} \dots\dots\dots - \frac{y^{(m)}}{a^{(m)}} + \frac{1-y^{(m)}}{1-a^{(m)}} \right)$$

Hiperparametrii

- Viteza de invatare (Learning rate) α

$$w_k = w_k - \alpha\, dw_k \quad (k=1\ldots n)$$

- Numar de epoci (iteratii)
- Numar de straturi ascunse
- Numar de unitati pe straturi ascunse
- Functia de activare pe fiecare nivel

Regularizarea ponderilor

- Ponderile obtinute in urma optimizarii pot sa nu fie unice
- Dorim sa impunem o preferinta asupra valorilor ponderilor, de exemplu sa penalizam ponderile cu valori mari pentru imbunatatirea generalizarii (sa nu aiba numai anumite intrari o influenta foarte mare asupra deciziei) – regularizarea ponderilor
- Daca preferam poderi cu valori mai mici raspandite uniform intr-un interval clasificatorul va lua in calcul cu aceeasi importanta toate intrarile cu ponderi oarecum asemnatoare (de acelasi ordin) decat sa considere mai importante numai anumite intrari
- Aceasta poate duce la imbunatatirea capacitatii de generalizare si la reducerea overfitting
- Valorile de prag nu au acelasi efect deoarece acestea nu controleaza puterea influentei intrarilor. Deci de obicei se aplica regularizarea numai ponderilor nu si valorilor de prag.

Regularizarea ponderilor

- Se adauga un ***termen de regularizare*** in functia de cost
- Se extinde functia de cost cu un termen de penalizare ***R(W)***
- Impiedica sa se potriveasca prea bine pe date (nu overfit)

$$J(\hat{y}, y_i) = -1/(m) * \Sigma_{i=1,m} [y^i \log\hat{y}^i + (1-y^i) \log(1-\hat{y}^i)]$$

$$\boxed{J(\hat{y}, y) = -\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} J_i(f(x_i, W), y_i) + \lambda R(W)}$$

Regularizarea ponderilor

Intensitatea regularizarii (hiperparametru)

$$J(\hat{y}, y) = \underbrace{-\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} J_i(f(x_i, W), y_i)}_{\text{Data loss}} + \underbrace{\lambda R(W)}_{\text{Regularizare}}$$

Exemple de R(W)

L2 regularization $R(W) = \sum_k \sum_l W_{k,l}^2$

L1 regularization $R(W) = \sum_k \sum_l |W_{k,l}|$

Elastic net (L1 + L2) $R(W) = \sum_k \sum_l \beta W_{k,l}^2 + |W_{k,l}|$

Regularizarea ponderilor

$$x = [1, 1, 1, 1]$$

$$w_1 = [1, 0, 0, 0]$$

$$w_2 = [0.25, 0.25, 0.25, 0.25]$$

$$w_1^T x = w_2^T x = 1$$

Prefera

L2 Regularization

$$R(W) = \sum_k \sum_l W_{k,l}^2$$

Mini-batch gradient descent

Mini-batch gradient descent

- In multe aplicatii, numarul de exemple poate fi foarte mare
- Nu se calculeaza functia de cost pe intreg setul de date pt a face o actualizare a ponderilor
- Utilizeaza GD pe un mini-lot (mini-batch) al datelor de antrenare
- De ex o retea CNN un mini-lot poate contine 256 de exemple din multimea de exemple care poate fi de ordinul milioanelor
- Performante mai bune cu mini-batch

Stochastic Gradient Descent (SGD)

- **Stochastic Gradient Descent -** mini-batch contine 1 exemplu
- Deoarece se foloseste vectorizare este mai eficient sa se faca simultan pe mai multe exemple
- Deci desi SGD se refera la 1 singur exemplu, se foloseste SGD pt mai multe, alese aleator din intreg lotul
- Dimensiunea mini-lotului este un hiperparametru
- In practica este o putere a lui 2 (32, 64, 128) datorita prelucrarii vectorizate

Exemple de DNN: Detectie obiecte

Exemple de DNN: Segmentare imagini

- Image Segmentation
  - Semantic Segmentation
    - FCN (2014)
    - UNet(2015)
    - ENet (2015)
    - PSPNet(2016)
    - Deeplab(2016)(2017)
    - SegFast(2019)
  - Instance Segmentation
    - Mask RCNN(2019)
    - Yolact(2019)
  - Panoptic Segmentation
    - Panoptic FPN(2019)
    - OANet(2019)

Exemple de DNN: Identificare fețe

Acknowledgement

O parte din slide-uri sunt
elaborate pe baza cursului lui Andrew Ng

Invatare automata

Universitatea Politehnica Bucuresti

Anul universitar 2021-2022

Adina Magda Florea

Curs Nr. 5

Reţele neurale convolutionale

1. Ce este convolutia?

- Convolutia este o tehnica utilizata in prelucrarea semnalelor, prelucrarea imaginilor, etc.
- Retelele neurale convolutionale - Convolutional Neural Networks (CNN sau ConvNets) sunt numite de la aeasta tehnica
- Convolutia in deep learning este de fapt, de cele mai multe ori, cross-correlation din prelucrarea imaginilor/semnalelor

Convolutie

- Compune 2 functii si exprima modul in care forma unei functii este modificata de cea de a 2-a

- In prelucrarea semnalelor/imaginilor convolutia se defineste astfel

$$s(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)g(t-x)dx = (f * g)(t)$$

$$s(i,j) = \int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} f(x,y)g(i-x,j-y)dxdy = (f * g)(i, j)$$

Cross-corelation

- Evalueaza cat de similare sunt 2 functii

$$C(i,j) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x,y)g(i+x,j+y)dxdy$$

- Functia g nu mai este oglindita

Cross-corelation

- Evalueaza cat de similare sunt 2 functii

$$C(i,j) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x,y)g(i+x,j+y)dxdy$$

- Functia g nu mai este oglindita

Cross-corelation

- In CNN, filtrul nu este oglindit, de cele mai multe ori, deci cross-corelation
- In ML – un numar finit de date (restul sunt 0) – dimensiune finita
- Input – o matrice multidimensionala de date
- Kernel – o matrice multidimensionala de parametrii modificate de algoritmul de invatare – tensori

$$s(i,j) = \sum_m \sum_n K(m,n) I(i-m, j-n)$$

$$s(i,j) = \sum_m \sum_n I(i-m, j-n) K(m,n)$$

Feature map

Input *Kernel*

Cross-corelation

$$s(i,j) = \sum_m \sum_n I(i-m, j-n) K(m,n)$$

Identity	$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$	
Ridge detection	$\begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 4 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \end{bmatrix}$	
	$\begin{bmatrix} -1 & -1 & -1 \\ -1 & 8 & -1 \\ -1 & -1 & -1 \end{bmatrix}$	

Sharpen	$\begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 5 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \end{bmatrix}$	
Box blur (normalized)	$\frac{1}{9}\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$	

2. Arhitectura CNN

- O retea simpla ConvNet este o secventa de straturi, in care fiecare strat transforma un volum de activari in alt volum printr-o functie derivabila

Arhitectura CNN

- Stratul de convolutie (**Convolutional layer - CONV)** calculeaza iesirea neuronilor care sunt conectati la regiuni locale ale intrarii, calculand produsul scalar intre ponderile lor si regiunea locala la care sunt conectati din intrare (volumul de intrare)
- Functia de activare este **RELU** pentru fiecare neuron
- Rezultatul convolutiilor – harta de activare (feature /activation map)

Arhitectura CNN

- Stratul **Pooling (POOL)** realizeaza o reducere a imaginii pe dimensiunea latime x inaltime
- Stratul total conectat (**Fully connected layer - FC)** calculeaza scorul claselor – fiecare neuron din acest strat este conectat la toti cei din straturile anterioare
  - CONV, FC au parametrii care se invata, RELU, POOL nu au
  - CONV, FC, POOL au hiperparametrii, RELU nu are

Avantajele CNN

- **Conexiuni locale.** Fiecare neuron nu mai este conectat la toti neuronii stratului anterior, ci doar la un numar mic de neuroni, ceea ce este eficient deoarece reduce numarul de parametri si accelereaza convergenta
- **Partajarea ponderilor.** Un grup de conexiuni poate partaja aceleasi ponderi, ceea ce reduce si mai mult numarul de parametrii
- **Reducerea dimensionalității.** Stratul de pooling folosește principiul corelatiei locale a imaginii pentru a reduce esantionarea unei imagini, ceea ce poate reduce cantitatea de date, pastrand in acelasi timp informatii utile. De asemenea, poate reduce numarul de parametri prin eliminarea caracteristicilor banale

Avantajele CNN

- **Pastrarea structurii spatiale a imaginii** (aranjarea spatiala a pixelilor din imagine)
- In contrast cu cazul in care am crea intrarea intr-o retea prin liniarizarea pixelilor din imagine
- De ex o imagine 32 x 32 x 3 cu 10 clase de iesire dorite am putea sa o liniarizam astfel

Imagine

- latine x inaltime x adancime (3)
- Imagine: RGB – Red, Green, Blue
- Video: YUV - Y- Luma (brightness) si 2 Chroma (colour), Cb/U si Cr/V.

3

Stratul de convolutie

- **Stratul de convolutie** – pastreaza structura spatiala
- Convolutia este un pas in extragerea caracteristicilor
- Convolutie intre un filtru (kernel) si o portiune din imagine – gliseaza peste imagine si calculeaza produsul scalar

Filtrul se extinde la intreaga adancime a intrarii

1 valoare

Rezultatul produsului scalar intre filtru si o portiune din imagine

$$W^T x + b$$

Stratul de convolutie

Aplica convolutia peste intreaga imagine

Rezultatul convolutiei – harta de activare (activation map/ feature map)

Stratul de convolutie

Se pot aplica mai multe filtre peste imagine, pentru a obtine diferite caracteristici ale imaginii

Fiecare filtru sintetizeaza un anumit template sau caracteristica a imaginii

Stratul de convolutie

Exemplu: 6 filtre cu un kernel de 5 x 5 conduc la 6 harti de activare
Rezultatul este o noua imagine avand dimensiunea 28 x 28 x 6

Straturile de convolutie

Serie de convolutii urmate de functii de activare
Fiecare strat are mai multe filtre si fiecare filtru produce o harta de activare

Hiperparametrii stratului de convolutie

- Controleaza dimensiunea volumului de iesire
- **Numarul de filtre - K** , sau **adancimea** volumului de iesire
- **Dimensiunea filtrului** – F X F
- **Stride – S** – cu cati pixeli se muta filtrul peste imagine cand gliseaza – pasul de glisare (cu cat mai mare S cu atat este mai mica densitatea)
- **Padding – P** – umplerea volumului pe margine - umplere
- *Zero padding* – umple volumul cu 0 pe margine astfel incat sa nu se piarda informatia de pe marginea volumului si sa se pastreze dimensiunea spatiala

Padding

Relatii intre dimensiuni

Input W1 x H1 x D1

Output W2 x H2 x D2

W2 = (W1-F+2P)/S + 1

H2 = (H1-F+2P)/S + 1

D2 = K

W1=H1=14, F=3, P=1, S=1

W2=(14-3+2*1)/1+1=14

H2=(14-3+2*1)/1+1=14

D2=64

W1=H1=28, F=3, P=1, S=1

W2=(28-3+2*1)/1+1=28

H2==(28-3+2*1)/1+1=28

D2=32

Relatii intre dimensiuni

- Exista **F x F x D1 ponderi per + bias** per filtru
- Exista un numar total **(F x F x D1) x K + K** parametrii

Dimensiuni tipice

K – puteri ale lui 2 (32, 64, 128, 512)

F = 3, S = 1, P =1

F = 5, S = 1, P =2

- Numarul de filtre - K
- Dimensiunea filtrului – F X F
- Stride – S
- Padding – P

Stratul Pooling

Reduce dimensiunea iesirii, deci reprezentarea
Dupa aplicarea convolutiei, harta de activare continue un nmar mare de caracteristici care pot crea probleme de overfitting
Stratul de pooling doreste sa reduca
Opereaza asupra fiecarei harti de activare independent

Stratul Pooling

Max pooling or average pooling

Stratul Pooling

Input W1 x H1 X D1
Output W2 x H2 X D2
Dimensiune pool - F
Stride - S

W1=H1=28, F=2, S=2, D1=32
W2=(28-2)/2+1=14
H2=(28-2)/2+1=14
D2=32

W2 = (W1-F)/S + 1
H2 = (H1-F)/S + 1
D2=D1

- Nu are parametrii asociati
- Dimensiuni tipice
- F=2, S=2 sau F=3, S=2

Pooling

- Există cercetători care propun să se renunțe la stratul de pooling și să folosească doar straturi CONV repetate
- Pentru a reduce dimensiunea reprezentării propun folosirea unui Stride (pas de glisare) mai mare, din cand in cand, în stratul CONV
- S-a constatat, de asemenea, că eliminarea straturilor de pooling este utila în antrenarea modelelor generative, cum ar fi variational autoencoders (VAEs) sau generative adversarial networks (GANs).

Stratul Fully connected

Neuronii din stratul conectat integral au conexiuni la toate activariule din stratul anterior, ca intr-o RN multi-nivel
Calculul activarii acestora este ca in RN

Stratul Fully connected

64 x 7 x 7 = 3136

Variatii ale operatiei de convolutie

- Dimensionalitatea convolutiei

- Spatialitatea convolutiei

Dimensionalitatea convolutiei

Ne referim in general la dimensiune 2D a convolutiei in CNN: filtrul gliseaza in 2 directii, lungine si inaltime imagine – convolutie bidimensionala

Exista inca 2 tipuri de convolutie: convolutie 1D (unidimensionala) si convolutie 3D (tridimensionala)

Convolutie 1D

Filtrul gliseaza intr-o singura directive, nu in 2 directii ca in 2D

Imagine de intrare, de ex, cu 120 pct (time step) si cele 3 componente 120 x 3,

Convolutie 1D

Filtrul gliseaza intr-o singura directive, nu in 2 directii ca in 2D

Convolutie 3D

Filtrul gliseaza in 3 dimensiuni

De exemplu date de la Computer Tomograf (CT)
Serie de imagini raze X din diferite unghiuri care produc o imagine 3D
Input 128 x 128 x 128 x 3

Convolutie dilatata

Dilated convolution (Atrous Convolution) pentru a surprinde o zona mai mare

Convolutia dilatate mareste filtrul prin inserarea de spatii intre elementele acestuia.

Rata de dilatare (dilation rate) indica cat de mult se mareste filtrul

(a) Filtru 3 x 3

(b) Un filtru 3 x 3 2-dilatat ($w_0x_{11}+w_1x_{13}+w_2x_{15}+..$)

(c) Un gfiltru 3 x 3 4-dilatat

Convolutie deformata

Deformable convolution – trateaza problema formei neregulate a obiectelor

Se focalizeaza pe zonele de interes, harta de activare fiind mai reprezentativa

(a) Un filtru de convolutie 3 x 3

(b) Un filtru de convolutie 3 x 3 deformat

Convolutia transpusa

- **Transposed convolution / deconvolution** – Transformarile se fac in directia opusa unei convolutii obisnuite, de ex pt generarea imaginilor de mare rezolutie si maparea hartilor de activare de dimensiuni reduce intr-un spatiu superior (auto-encoder, segmentare semantica)
- Convolutia transpusa este cunoscuta si ca deconvolutie desi numele este mai putin potrivit deoarece nu este o deconvolutie reala in sensul avut in prelucrarea semnalelor
- In acel caz deconvolutie semnalului inverseaza operatia de convolutie, ceea ce nu face convolutia transpusa

Convolutia transpusa

O convolutie transpusa se poate implementa cu o convolutie obisnuita

Aplica o convolutie transpusa cu un filtru 3 x 3 peste un input de 2 x2 cu 0-padding de 2 x 2 folosind Stride 1

Imaginea rezultata este 4 x 4.

Convolutia transpusa

Se mapeaza aceeasi imagine de intrare de 2 x 2 la o imagine de dimensiune diferita, aplicand padding si stride

Convolutie transpusa aplicata pe o intrare de 2 x 2 (cu 0 intre pixeli) 0-padded cu 2 x 2 border si stride 1

Iesirea este 5 x 5.

Comparatie dilated cu maxpool si transposed

Iesirea continue mai multe detalii

operator Sobel –
detective margini (edge)

Acknowledgement

Slide-uri bazate partial pe:

- Fei-Fei Li course “Convolutional Neural Networks for visual Recognition” (Stanford)
- Notes of Kunlun Bai on Different Types of Convolutions
- Z. Li, W. Yang, S. Peng, and F. Liu, “A Survey of Convolutional Neural Networks: Analysis, Applications, and Prospects”, 2020, arXiv: 2004.02806

Invatare automata

Universitatea Politehnica Bucuresti

Anul universitar 2021-2022

Adina Magda Florea

Curs Nr. 6

Reţele neurale cu auto-organizare

- **Retele Kohonen (SOM)**

Rețele Kohonen

- Retele de tip harta cu auto-organizare a caracteristicilor (SOM - **self-organizing feature maps**) - inventate de Teuvo Kohonen, profesor la Academia din Finlanda, 1989
- Se inspira din modelul biologic – pozitia neuronilor are importanta
- ***Invatare nesupervizata***
- Ofera o modalitate de a reprezenta date multi-dimensionale in spatii dimensionale reduse, de obicei 1-2 dimensiuni = ***cuantificarea vectorilor***
- Tehnica Kohonen creaza o retea care memoreaza informatia astfel incat orice relatie topologica din setul de invatare este mentinuta.

EXEMPLU de utilizare a unei retele SOM

- Maparea culorilor pe baza componentelor RGB (3D) in doua dimensiuni – o retea SOM antrenata sa recunoasca 8 culori
- Culorile au fost prezentate retelei ca vectori 3D, cu cate o dimensiune pt. fiecare componenta a culorii – reteaua a invatat sa reprezinte culorile intr-un spatiu 2D.
- Pe langa clusterizarea culorilor in regiuni distincte, regiunile cu proprietati similare sunt plasate de obicei adiacent una de cealalta.

Idei SOM

- La prezentarea exemplelor ponderile creaza clustere care impart spatiul de intrare a.i iesirile activate tind sa aproximeze functia de densitate de probabilitate a intrarii
- Ponderile sunt actualizate a.i. noduri apropiate topologic sunt senzitive la intrari fizic similare = ***topogy preserving maps***
- **M** noduri de iesire si **N** intrari
- In timpul invatarii, unitatea (dintr-un cluster) care are ponderi cat mai apropiate de valorile de intrare (distanta Euclidiana minima) este aleasa pe post de ***castigator***
- Unitatea castigatoare si vecinii ei isi actualizeaza ponderile
- Necesita definirea unei ***vecinatati*** in jurul fiecarei unitati, care descreste in timp

Structura SOM

- Iesirile retelei pot fi organizate unidimensional (vector) sau bi-dimensional (matrice)

Retea cu 2 intrari (N=2) si 9 iesiri (M=9) (bi-dimensionala)

Retea cu 2 intrari (N=2) si 3 iesiri (M=3) (uni-dimensionala)

Structura SOM

R = 0

R = 1

R = 2

Algoritmul de invatare SOM

1. Initializeaza ponderile, fixeaza dim. vecinatatii topologice **R** si rata de invatare $\alpha(t_0)$

   (initial ponderi aleatore cu val mici sau nealeatoare)

2. **pentru** fiecare x^s_i **executa**

   2.1 calculeaza distanta pt toate nodurile de iesire

   d_j – dist intre intrari **i**(i=1,N) si noduri iesire **j**(j=1,M)

   $x^s_i(t)$ – intrarea **i** la momentul **t**

   $w_{ij}(t)$ – ponderea intre intrarea **i** si nodul de iesire **j**

$$d_j = \Sigma_{i=1,N}(x^s_i(t) - w_{ij}(t))^2$$

   2.2 Selecteaza nodul cu distanta minima: **j* cu** d_j **min**

   2.3 Actualizeaza ponderile unitatii **j*** si ale unitatilor din vecinatatea Ne_{j*}

$$w_{ij}(t+1) = w_{ij}(t) + \alpha(t)\,(x^s_i(t) - w_{ij}(t))$$

   pentru **j** in NE_{j*} la momentul **t**, i=1,N

3. Reduce **R**

4. **repeta** de la 2 pana conditie de oprire

sfarsit

j* - Best Matching Unit (BMU)
La fiecare iteratie BMU si vecinii sunt mutati mai aproape de vectorul de intrare

Exemplu

- 4 vectori (s=4) cu 4 elemente (N=4)
  (1 1 0 0) (0 0 0 1) (1 0 0 0) (0 0 1 1)
- 2 clustere (M=2)
- $\alpha(0) = 0.6$ $\alpha(t+1)=0.5*\alpha(t)$
- Ponderi initiale

.2 .8
.6 .4
.5 .7
.9 .3 R=0 $d_j = \Sigma_{i=1,N}(x^s_i(t) - w_{ij}(t))^2$

(1,1,0,0) $D(1) = (0.2-1)^2+(0.6-1)^2+(0.5-0)^2+(0.9-0)^2=1.86$
D(2) $=(0.8-1)^2+(0.4-1)^2+0.7-0)^2+(0.3-0)^2 =$ **0.98**
J=2

$w_{i2}^{nou}=w_{i2} +0.6(x_i-w_{i2})$

$$\mathbf{w_{ij}(t+1) = w_{ij}(t)+ \alpha(t) (x^s_i(t) - w_{ij}(t))}$$

.2 .92
.6 .76
.5 .28
.9 .12

- (0 0 0 1)

  .08 .92
  .24 .76
  .20 .28
  .96 .12
- (1 0 0 0)

  .08 .968
  .24 .304
  .20 .112
  .96 .048
- (0 0 1 1)

  .032 .968
  .096 .304
  .680 .112
  .984 .048

- Se reduce rata de invatare
- α=0.5*0.6 = 0.3
- Epoca 100 matricea devine

  6.7e-17 1.0000
  2.0e-16 0.4900
  0.5100 2.3e-16
  1.0000 1.0e-16

  0.0 1.0
  0.0 0.5
  0.5 0.0
  1.0 0.0

(1 1 0 0) (0 0 0 1) (1 0 0 0) (0 0 1 1)

Cati neuroni (ponderi) se actualizeaza

WTA (Winner Takes All) –

selecteaza neuronul cu distanta Euclidiana minima (castigator)

si actualizeaza numai ponderile acestuia

- **WTM** (Winner Takes Most) – selecteaza neuronul cu distanta Euclidiana minima si actualizeaza ponderile acestuia si a neuronilor dintr-o vecinatate de raza R
- WTM are o convergenta mai buna decat WTA
- In WTM mai multi neuroni au ponderile actualizate in fiecare iteratie.

$$\mathbf{w_{ij}(t+1) = w_{ij}(t) + \alpha(t)\,(x^s_i(t) - w_{ij}(t))}$$

pentru i=1,N, j=j* si j $\in NE_{j*}$ de raza R(t),

s =1,Nr exemple

• Viteza de invatare si raza vecinatatii se modifica la fiecare epoca conform:

$$\alpha(t+1) = \Delta\alpha\ \alpha(t) \qquad R(t+1) = \Delta R\ R(t)$$

cu $\Delta\alpha$ si ΔR factori constanti

De ex $R(t) = 0.5s \exp(-t\log(0.5s)/t)$ cu s nr de puncte ale laturii hartii

• Actualizare ponderi – varianta

$$\mathbf{w_{ij}(t+1) = w_{ij}(t) + \alpha(t)\ \beta(t)(x^s_i(t) - w_{ij}(t))}$$

$$\mathbf{\beta(t) = \exp(-\ d_j / R(t)^2)}$$

Alte modele de vecinatate

Distributie gausiana

Palarie Mexicana
(Maxican hat)

Exemplu: Proiectul WEBSOM

Prof Kohonen Univ Helsinki

- Organizarea si vizualizare colectiilor de documente in timp real cu un SOM
- Dimensiunea intrarii –43,222
- 1 dimensiune corespunde frecventei de aparitie a unui cuvant in document
- SOM cu 1,002,240 neuroni
- 6,840,568 documente cu patente
- **Optimizari pt cresterea vitezei de invatare**

- **Optimizare: Reducerea dimensiunii**

Algoritmul Random Projection

Vectori histograma

- fiecare componenta a vectorului corespunde frecventei de aparitie a unui cuvant
- Cuvintele sunt associate cu ponderi care reflecta puterea lor de discriminare intre topici
- De gasit un subset adecvat de vectori care grupeaza bine documentele
  - **Randomly Projected Histograms**
- Pornind de la dimensiunea d originala a datelor X se proiecteaza intr-un subspatiu de dimensiune k (k << d)

- Foloseste o matrice aleatoare R de dimensiune k x d, elementele din fiecare coloana sunt vectori cu valori cu o distributie normala de lungime unitara

  $R_{k \times d}\, X_{d \times N}$ => noua matrice $X_{k \times N}$

De ce functioneaza?

- Lema Johnson – Lindenstrauss

  “Daca punctele dintr-un spatiu de n dimensiuni sunt proiectate intr-un spatiu ales aleator de o dimensiune mai mica convenabila, atunci distanta dintre puncte este aproximativ pastrata”
- Similaritatea unei perechi de vectori proiectati este aceeasi, in medie, cu similaritatea perechii corespunzatoare de vectori originali
- Similaritatea este calculate ca produs scalar al celor 2 vectori

- **Alte 2 optimizari**
- Ponderi pregenerate
- Limitarea cautarii neuronilor castigatori

Alt proiect care a utilizat SOM

- Classifying World Poverty

The Country Names

AFG	Afghanistan	GTM	Guatemala	NZL	New Zealand
AGO	Angola	HKG	Hong Kong	OAN	Taiwan, China
ALB	Albania	HND	Honduras	OMN	Oman
ARE	United Arab Emirates	HTI	Haiti	PAK	Pakistan
ARG	Argentina	URY	Uruguay	PAN	Panama
AUS	Australia	BFA	Burkina Faso	PER	Peru
AUT	Austria	IDN	Indonesia	PHL	Philippines
BDI	Burundi	IND	India	PNG	Papua New Guinea
BEL	Belgium	IRL	Ireland	POL	Poland
BEN	Benin	IRN	Iran, Islamic Rep.	PRT	Portugal
BGD	Bangladesh	IRQ	Iraq	PRY	Paraguay
BGR	Bulgaria	ISR	Israel	ROM	Romania
BOL	Bolivia	ITA	Italy	RWA	Rwanda
BRA	Brazil	JAM	Jamaica	SAU	Saudi Arabia
BTN	Bhutan	JOR	Jordan	SDN	Sudan
BUR	Myanmar	JPN	Japan	SEN	Senegal
BWA	Botswana	KEN	Kenya	SGP	Singapore
CAF	Central African Rep.	KHM	Cambodia	SLE	Sierra Leone
CAN	Canada	KOR	Korea, Rep.	SLV	El Salvador
CHE	Switzerland	KWT	Kuwait	SOM	Somalia
CHL	Chile	LAO	Lao PDR	SWE	Sweden
CHN	China	LBN	Lebanon	SYR	Syrian Arab Rep.
CIV	Cote d'Ivoire	LBR	Liberia	TCD	Chad
CMR	Cameroon	LBY	Libya	TGO	Togo
COG	Congo	LKA	Sri Lanka	THA	Thailand
COL	Colombia	LSO	Lesotho	TTO	Trinidad and Tobago
CRI	Costa Rica	MAR	Morocco	TUN	Tunisia
CSK	Czechoslovakia	MDG	Madagascar	TUR	Turkey
DEU	Germany	MEX	Mexico	TZA	Tanzania
DNK	Denmark	MLI	Mali	UGA	Uganda
DOM	Dominican Rep.	MNG	Mongolia	URY	Uruguay
DZA	Algeria	MOZ	Mozambique	USA	United States
ECU	Ecuador	MRT	Mauritania	VEN	Venezuela
EGY	Egypt, Arab Rep.	MUS	Mauritius	VNM	Viet Nam
ESP	Spain	MWI	Malawi	YEM	Yemen, Rep.
ETH	Ethiopia	MYS	Malaysia	YUG	Yugoslavia
FIN	Finland	NAM	Namibia	ZAF	South Africa
FRA	France	NER	Niger	ZAR	Zaire
GAB	Gabon	NGA	Nigeria	ZMB	Zambia
GBR	United Kingdom	NIC	Nicaragua	ZWE	Zimbabwe
GHA	Ghana	NLD	Netherlands		
GIN	Guinea	NOR	Norway		
GRC	Greece	NPL	Nepal		

- Classifying World Poverty
- World Poverty Classifier - SOM care mapeaza tarile pe baza a 39 de factori care cuantifica calitatea vietii, de ex stare de sanitate, calitatea nutritiei, educatie, etc.
- Colorarea tarilor pe harta lumii pe baza clasificarii anterioare

Exemplu: Problema comis voiajorului

- Coordonatele orasului – intrari
- Unitati cluster = nr de orase
- Topologie liniara circulara

- Se utilizeaza o retea Kohonen uni-dimensionala
- Numarul de neuroni este egal cu numarul de orase
- Daca ponderile unui neuron sunt egale cu coordonatele unui oras atunci acest neuron reprezinta orasul
- Neuronii sunt organizati intr-un vector. Acest vector reprezinta secventa de orase vizitate.
- DAR valorile ponderilor unui neuron nu sunt de obicei egale (exact) cu coordonatele orasului desi ponderile sunt aproriate de valorile coordonatelor oraselor.

Problema comis voiajorului

- Este necesara utilizarea unui algoritm de "**reparare**" care modifica ponderile a.i. sa ajunga egale cu coordonatele oraselor. In algoritm, daca un neuron $\mathbf{n_i}$ este atribuit unui oras **A** aceasta inseamna ca ponderile neuronului $\mathbf{n_i}$ sunt egale cu coordonatele orasului **A**.

Algoritm de reparare

1. **pentru** fiecare neuron *j* = 1,M **executa**

   1.1 *Oras_apropiat* = cel mai apropiat oras de neuronul *j*

   1.2 **daca** *Oras_apropiat* nu este atribuit unui neuron **atunci**

   - atribuie *Oras_apropiat* neuronului *j*

   altfel elimina neuronul *j*

2. **pentru** fiecare oras *k* = 1,M **executa**

   2.1 **daca** orasul *k* nu este atribuit unui neuron **atunci**

   - creaza un nou neuron *t* si atribuie orasul *k* acestui neuron

   - *Neuron_apropiat* = cel mai apropiat oras/neuron de orasul *k*

   - insereaza noul neuron *t* inainte sau dupa *Neuron_apropiat*, in functie de care circuit este mai scurt

sfarsit

Problema comis voiajorului

- Dupa aplicarea acestui algoritm se gaseste destul de repede o solutie destul de buna (nu optima) dar care poate fi imbunatatita.
- Solutia poate fi in continuare optimizata folosind algoritmul *2opt*. De obicei *2opt* nu schimba cu mult solutia deoarece solutia este deja destul de buna.
- Algoritmul *2opt* selecteaza o parte a circuitului, il inverseaza, si il introduce inapoi in circuit. Daca noul circuit obtinut este mai scurt decat cel initial, atunci inlocuirea devine permanenta.
- De exemplu, daca avem un circuit (A, B, C, D, E, F) si o cale (B, C, D) care o inversam, atunci noul circuit este (A, D, C, B, E, F).
- Algoritmul se opreste daca nu se mai obtin imbunatatiri.

Problema comis voiajorului

- Valori experimentale (bune) gasite pentru modificarea vitezei de invatare si a razei
- **100 orase $\alpha(0) = 0.6$, $\Delta\alpha = 0.9997$, $\Delta R = 0.999$**
- **500 orase $\alpha(0) = 0.7$, $\Delta\alpha = 0.999985$, $\Delta R = 0.9994$**
- **1000 orase $\alpha(0) = 0.69$, $\Delta\alpha = 0.99992$, $\Delta R = 0.9996$**
- In fiecare caz numarul de epoci este 25000.
- **Rezultate obtinute**
- S-au utilizat in teste atat orase generate aleator cat si seturi de date de test din TSPLIB

http://comopt.ifi.uni-heidelberg.de/software/TSPLIB95/

Solutie SOM fara optimizare *2opt*.
Exista 2 buce locale. Primul si ultimul neuron se pot vedea la mijlocul figurii.
Ei nu sunt conectati in figura dar distanta dintre ei este calculata.

Solutia SOM
dupa aplicarea optimizarii *2opt*

Circuit optim pentru
255 de orase,
obtinut din TSPLIB,
cu cost (optim) **3916**

Circuit generat de SOM *2opt*,
cu cost **4130** (5.19% mai mare)

Vizualizare - Hit histogram (Hit maps)

Arata distributia pe harta, de cate ori un neuron este ales ca BMU

Se formeaza luand un set de date, se afla BMU pt fiecare data din harta si crestem un contor asociat hartii de fiecare data cand se detecteaza un BMU

Vizualizare – U-matrix

Vizualizeaza distanta dintre neuroni. Distanta intre neuroni adiacenti este calculate si prezentata sub forma de nuante de gri sau diferite culori. O culoare inchisa intre neuroni corespunde unei distante mari si deci un gap intre ponderi si spatial de intrare. O culoare deschisa intre neuroni inseamna ca vectorii sunt apropiati unul de altul. Zonele deschise pot fi vazute ca grupuri (clusters) si cele inchise ca separatori ai grupurilor.

SOM Ierarhice

- Se utilizeaza in domenii in care o descompunere structurala in probleme mai mici stratificate este convenabila
- Una sau mai multe SOM sunt localizate pe nivele, fiecare harta operand pe diferite variabile tematice
- Folosite mult la intelegerea vorbirii, unde fiecare nivel trateaza diferite unitati de vorbire: foneme, silabe, parti de cuvant, cuvinte

SOM Ierarhice

- Pot fi organizate cu diferite harti partiale la nivele inferioare care grupeaza datele in functie de diferite caracteristici si apoi trimit rezultatul catre SOM de pe nivele superioare
- Alternativ pot avea un SOM global pe nivelul inferior care functioneaza ca un mechanism de selectie pentru activarea uneia sau a mai multor harti care se specializeaza in anumite zone din spatial de intrare

Deep SOM

Kernel
Stride
Scale1
Input Image
Kernel
Stride
Scale2
SOM Layer1
SOM Layer1
Sampling Layer
Sampling Layer
Sampling Layer1
SOM

Kernel
Stride
M
Map size

Nmaps

Invatare automata

Universitatea Politehnica Bucuresti
Anul universitar 2021-2022

Adina Magda Florea

Curs nr. 7

- Invatarea prin recompensa - Intro
- Sistem Markov cu recompensa
- Proces de decizie Markov (MDP)
- Reinforcement learning (RL)
- Exemplu simplificat de RL
- Generalizare RL

1. RL - Introducere

- Mult timp – probleme simple
- Ultimii 5-10 ani – multe aplicatii diferite
- Atari game – David Silver 2015
- Planificare, Roboti, Optimizare

Figure: DeepMind Nature, 2015

Figure: Chelsea Finn, Sergey Levine, Pieter Abbeel

Model general invatare (vezi curs 1)

$T = \{\mathbf{X_1}, \mathbf{X_2}, \ldots, \mathbf{X_m}\}$ – **multime de invatare**

$f(\mathbf{X}) = ?$

$\mathbf{X_i} = \text{Stare}_i \longrightarrow \boxed{h} \longrightarrow h(\mathbf{X_i})$

$h \in \mathbf{H}$

Invatare prin recompensa

- Se cunosc recompensele pentru **Stare$_i$,** i=1,m
- $h(X_i)$ reprezinta actiunea de executat in starea X_i
- $f(\mathbf{X_i})$ – actiunea optima de executat in X_i
- Trebuie gasit **h** a.i. $h(\mathbf{X_i}) = f(\mathbf{X_i})$, $\forall$**Stare$_i$**

RL - Introducere

- Reinforcement Learning (RL) = Invatarea prin recompensa
- Agentul invata o comportare in mediu pe baza interactiunilor cu mediul, prin explorari succesive
- Mediul ofera un feed back – **recompensa** = reinforcement

RL - Intro

- **Invatare prin recompensa** = invata sa asocieze **actiuni** unor **stari** a.i. sa maximizam un ***semnal numeric de recompensa***.
- **Cum?** Incearca actiuni pt a descoperi acele actiuni care aduc o recompensa mai mare.
- Actiunile afecteaza **recompensa imediata** dar si urmatoarele stari, si prin aceastea, **recompensele viitoare** (**recompensa intarziata**)

RL - Caracteristici

- **Optimizare** – agentul invata sa ia decizii in conditii de incertitudine
- **Consecinte intarziate** – agentul nu stie imediat modul in care deciziile lui sunt asociate cu rezultate bune (temporal credit assignment problem)
- **Explorare** – agentul trebuie sa invete o serie de decizii si trebuie sa le invete prin explorare
- **Generalizare** – daca exista foarte multe stari
- **Agentul nu are un model al mediului**

Sistemul RL

A – agent RL
s – starea curenta a mediului
r – valoarea recompensei
(reinforcement signal)
a – actiunea agentului
T – modelul de evolutie a mediului

Modelul sistemului:

- o multime discreta de stari ale mediului S ($s \in S$)
- o multime discreta de actiuni ale agentului A ($a \in A$)
- o multime de semnale de recompensa, $r \in R$
- modelul de tranzitie al lumii, T (necunoscut de agent in RL)

- Pentru un mediu **nedeterminist, modelul tranzitiei mediului** este

$$T : S \times A \rightarrow \boldsymbol{P}(S)$$

Notatii posibile **T(s, a, s') sau**

$$P^{a}_{s,s'} = Prob(Urm = \mathbf{s'} | Curenta = \mathbf{s}\ ,\ actiune\ \mathbf{a})$$

Exemplu mediu nedeterminist = grid 3 x 4

- Iesirea dorita se produce cu probabilitate de 0.8, si cu probabilitate de 0.2 (0.1, 0.1) agentul se muta in directii deviate cu 90^0 stanga sau dreapta.
- 2 stari terminale au recompensa **+1** si **–1**, toate celelalte stari au recompensa **–0.04**

Sus, Sus, Dreapta, Dreapta, Dreapta
(1,1) → (4,3)

Sistemul RL

- **Modelul sistemului**
  - Starile mediului S ($s \in S$)
  - Actiunile agentului A ($a \in A$)
  - Functia de recompensa, R: S x A $\rightarrow$ R
  - Modelul de tranzitie al lumii, T (necunoscuta de agent)
- **Politica agentului**
  - **π: S $\rightarrow$ A**
- Agentul trebuie sa gaseasca, prin experiente repetate, o **politica π** = **functie** care pune in corespondenta **stari** cu **actiuni**
- Politica trebuie sa **maximizeze o masura a recompensei pe termen lung – valoare sau utilitate**
- **Politica optima π^***

Sistemul RL

- **Valoarea** (functia valoare) sau **Utilitatea** unei stari **U(S)** – estimare pe termen lung a "cat de buna" este o stare
  - **Valoarea unei stari** este ***suma totala a recompensei*** pe care un agent spera sa o accumuleze in viitor, pornind de la o anumita stare.
  - Valorea unei stari poate fi vazuta ca **predictia recompensei pe termen lung**
  - Se cauta stari cu valori mari si nu cu recompense mari

Sistemul RL

- Mediu **este <u>nedeterminist</u>**
- Agentul nu are un **model al mediului** (T)
- Agentul invata numai **comportarea** sau **comportare si un model al mediului**
- Cum isi reprezinta agentul comportarea
  - **Utilitate/valoare a starilor** – **$U^{\pi}(s)$ / $V^{\pi}(s)$**
  - **Utilitate/valoare a perechilor stare-actiune – $Q^{\pi}(s,a)$**

RL - Probleme

- 2 probleme
- **Predictie** – evaluarea politicii – invatarea valorii unei stari sau a unei perechi stare-actiune pentru o politica data
- **Control** – gaseste / aproximeaza o politica optima
- Mentine o politica aproximativa si o functie valoare aproximativa. Functia valoare este modificata repetat pentru a se apropia de politica curenta si politica este imbunatatita repetat in raport cu functia valoare curenta. Impreuna se apropie de valorile optime.

$Q^{\pi}(s, a)$

2. Modele de comportare ale agentului RL

- **Modelul orizontului finit**: agentul parcurge un numar de *n* stari, ajunge in starea finala – ***episod***, apoi episodul se reia

$$U(S_t) = (\Sigma_{t=0,\, n}\, R(S_t,a))$$

$R(S_t)$ - recompensa primita in starea S_t cu actiunea a

U – recompensa estimata

- **Modelul orizontului infinit:** agentul traieste la nesfarsit si estimeaza recompensa pe termen lung

$$U(S_t) = (\Sigma_{t=0,\infty}\, R(S_t,a))$$

U – utilitatea / recompensa estimata pe termen lung

Modele de comportare ale agentului RL

- **Modelul orizontului infinit atenuat:** estimeaza recompensa pe termen lung dar recompensele viitoare sunt scazute cu un factor de atenuare δ.

$$U(S_t) = (\Sigma_{t=0,\infty} \delta^t R(S_t,a))$$

U – utilitate / recompensa estimata pe termen lung atenuata

$0 \leq \delta < 1$.

δ - dobanda, atenuarea, probabilitatea de a trai inca un moment de timp, artificiu matematic pt. a avea o limita la suma.

Exemplu - Orizont infinit atenuat

Recompensa atenuata

Un functionar este platit 20B pe an

Cat va castiga in total?

Cum calculam U(A) U(B) U(C) ....

Factor de atenuare δ

Suma atenuata a recompenselor viitoare (estimata)

3. Sistem Markov

- Multime de stari **(S_1, S_2,…S_n)**
- Matrice de probabilitati de tranzitie (**$P : S \rightarrow \Pi(S)$**)

$$\mathbf{P_{ij} = Prob(Urmatoare=S_j \mid Curenta = S_i)}$$

- **Proprietatea Markov**

$$p(\mathbf{X}) = \prod_{i=1}^{n} p(X_n|X_{n-1})$$

1st order

$$p(\mathbf{X}) = \prod_{i=1}^{n} p(X_n|X_{n-1}, X_{n-2})$$

2nd order

Sistem Markov (MS) cu recompensa

- Multime de stari **(S_1, S_2,…S_n)**
- Matrice de probabilitati de tranzitie (**$P : S \rightarrow \Pi(S)$**)

  P_{ij} = Prob(Urmatoare=S_j | Curenta = S_i)
- Are proprietatea Markov de ordinul 1
- Fiecare stare are o recompensa r_1, r_2,…r_n (**$R: S \rightarrow R$**)
- Factor de atenuare $\delta \in [0,1]$
- In fiecare pas

  - Starea este S_i

  - Obtine recompensa r_i

  - Trece intr-o noua stare S_j cu probabilitatea P_{ij}

  - Toate recompensele viitoare sunt atenuate cu δ

Rezolvare sistem Markov cu recompensa - Determinarea utilitate stari

$U^*(S_i)$ = suma estimata atenuata a recompenselor viitoare incepand din starea S_i (valoare stare sau utilitatea)

$$U^*(S_i) = r_i(S_i) + \delta[P_{i1}U^*(S_1) + P_{i2}U^*(S_2) + .. + P_{in}U^*(S_n)]$$

$$i=1,n$$

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} U^*(S_1) \\ U^*(S_2) \\ \dots \\ U^*(S_n) \end{pmatrix} \qquad \mathbf{R} = \begin{pmatrix} r_1 \\ r_2 \\ \\ r_n \end{pmatrix} \qquad \mathbf{P} = \begin{pmatrix} P_{11}\ P_{12} \dots P_{1n} \\ P_{21}\ \dots \\ \\ P_{n1}\ P_{n2} \dots P_{nn} \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{U} = \mathbf{R} + \delta\ \mathbf{P}^*\mathbf{U} \qquad (\ r_i = R(S_i)\ )$$

Rezolva un sistem de *n* ecuatii cu *n* necunoscute

Exemplu - Orizont infinit atenuat

Un functionar este platit 20B pe an

Cat va castiga in total?

Factor de atenuare δ

Cum calculam U(A) U(B) U(C) ....

U(A) = 20 + δ[0.6*U(A) + 0.2*U(B) + 0.2*U(D)]

U(B) = 60 + δ[0.6*U(B) + 0.2*U(C) + 0.2*U(D)]

....

Iterarea valorii pentru MS cu recompensa

- **Rezolvarea sistemului de ecuatii**

Avantaj – obtine un raspuns exact

Dezavantaj – pt 100 000 stari se rezolva un sistem de 100 000 ecuatii cu 100 000 necunoscute

- **Rezolvarea iterativa - Value iteration (Iterarea valorii) pt MS**

$U^1(S_i)$, $U^2(S_i)$, $U^3(S_i)$ = …. $k \to \infty$ $U^k(S_i) \to U^*(S_i)$

1. Calculeaza $U^1(S_i)=r_i$ pentru fiecare stare S_i, $k \leftarrow 1$

2. repeta

$k \leftarrow k + 1$

Calculeaza $U^k(S_i) = r_i + \delta \Sigma_{j=1,n} (P_{ij}U^{k-1}(S_j))$ pentru fiecare stare S_i

pana $\max_i |U^k(S_i) - U^{k-1}(S_i)| < eps$

Value iteration

k	U^k(SUN)	U^k(WIND)	U^k(HAIL)
1	4	0	-8
2			
3			
4			
5			

Value iteration

k	U^k(SUN)	U^k(WIND)	U^k(HAIL)
1	4	0	-8
2	5	-1	-10
3			
4			
5			

Value iteration

k	U^k(SUN)	U^k(WIND)	U^k(HAIL)
1	4	0	-8
2	5	-1	-10
3	5	-1.25	-10.75
4	4.94	-1.44	-11
5	4.88	-1.52	-11.11

4. Proces de decizie Markov (MDP)

<S, A, P, R>

S – multime de stari

A – multime de actiuni

R – functia recompensa, **R: S x A → R**

P : S x A → Π(S), functia de tranzitie probabilistica, cu Π(S) distributia de probabilitate peste S

$P^a_{s,s'}$=Prob(Urm=**s'**|Curenta=**s** si actiune **a**)

- In fiecare pas
  - Starea este **S**
  - Alege o actiune **a** (din $a_1 \ldots a_k$)
  - Trece in **S'** cu probabilitatea $\mathbf{P^a_{s,s'}}$
  - Obtine recompensa $\mathbf{R_i}$
  - Toate recompensele viitoare sunt atenuate cu **δ**

Vom folosi T(s,a,s') pentru $P^a_{s,s'}$

MDP

S – Save
A - Advertise

Politici

Politica 1

Stare	Actiune
PU	S
PF	A
RU	S
RF	A

Politica 2

Stare	Actiune
PU	A
PF	A
RU	A
RF	A

Markov Decision Process (MDP) – proprietati

- MDP: stari finite si actiuni finite / stari si actiuni infinte
- Alegerea unei politici π; alegerea unei politici optime π^*
- **Pentru fiecare MDP exista o politica optima**
- **Politica optima** = o politica a.i. din fiecare stare posibila nu exista o optiune mai buna decat sa urmeze acea politica

- Fiind dat un model **T, gasirea unei politici optime** = calculeaza **utilitatile** fiecarei stari $U(S_i)$ si foloseste utilitatea starilor pentru a selecta actiunea optima in fiecare stare **sau** gaseste **direct politica optima**

Ecuatiile Bellman - $U^{\pi}(s)$

- **Utilitatea unei stari** este recompensa imediata plus suma atenuata a recompenselor viitoare (estimate) din starea urmatoare, presupunand ca agentul selecteaza cea mai buna actiune (utilizeaza π^*)

$$U(s) = \max_a [R(s,a) + \delta \Sigma_{s'} T(s,a,s') U(s')]$$

- *Principle of Optimality: An optimal policy has the property that whatever the initial state and initial decision are, the remaining decisions must constitute an optimal policy with regard to the state resulting from the first decision. (Bellman, 1957)*

- Utilitatile starilor sunt solutiile acestor ecuatii

Mediu - grid 4 x 3

- Iesirea dorita se produce cu probabilitate de 0.8, si cu probabilitate de 0.2 (0.1, 0.1) agentul se muta in directii deviate cu 90^0 stanga sau dreapta.
- 2 stari terminale au recompensa +1 si –1, toate celelalte stari au recompensa –0.04
- $\delta = 1$

Recompense

	1	2	3	4
3	-0.04	-0.04	-0.04	+1
2	-0.04		-0.04	-1
1		-0.04	-0.04	-0.04

Utilitati/Valori

	1	2	3	4
3	0.812	0.868	0.918	+1
2	0.762		0.660	-1
1	0.705	0.655	0.611	0.388

Ecuatia Bellman pentru grid-ul 4x3

Ecuatia pentru starea (1,1)

$$U(1,1) = -0.04 + \delta \max\{\ 0.8\,U(1,2) + 0.1\,U(2,1) + 0.1\,U(1,1),$$

Up

$$0.9U(1,1) + 0.1U(1,2),$$

Left

$$0.9U(1,1) + 0.1U(2,1),$$

Down

$$0.8U(2,1) + 0.1U(1,2) + 0.1U(1,1)\}$$

Right

Up este cea mai buna actiune

3	0.812	0.868	0.918	+1
2	0.762		0.660	-1
1	0.705	0.655	0.611	0.388
	1	2	3	4

2 stari terminale au recompensa +1 si –1
toate celelalte stari au recompensa –0.04
$\delta = 1$

Value iteration pt MDP

$U^1(S_i)=R(S_i)$

$U^2(S_i) = \max_a [\ R(S_i,a) + \delta\ \Sigma_{j=1,n}\ T(S_i,a,S_j)\ U^1(S_j)\ ],\quad S_j=succ(S_i)$

….

$U^{k+1}(S_i) = \max_a [\ R(S_i,a) + \delta\ \Sigma_{j=1,n}\ T(S_i,a,S_j)\ U^k(S_j)]$

$\mathbf{k \to \infty\ \ U^k(S_i) \to U^*(S_i)}$

1. Calculeaza $U^1(S_i)$ pentru fiecare stare S_i , $k \leftarrow 1$
2. **repeta**

   $k \leftarrow k+1$

   Calculeaza $U^k(S_i)$ pentru fiecare stare S_i

   pana $\max_i |U^k(S_i) - U^{k-1}(S_i)| < eps$

MDP

S – Save
A - Advertise

Value iteration pt MDP

k	$U^k(PU)$	$U^k(PF)$	$U^k(RU)$	$U^k(RF)$
1	0	0	10	10
2	0	4.5	14.5	19
3	2.03	6.53	25.08	25.07
4	3.852	12.20	29.63	??
5	7.22	15.07	32.00	??
6	10.03	17.65	33.58	??

?? – sa se calculeze

Gasirea politicii optime

- Daca cunoastem $U(S_i)$ pentru toate starile S_i
- Defineste "cea mai buna actiune" in S_i ca fiind

$$\arg\max_a [R(S_i,a) + \delta \Sigma_{j=1,n} T(S_i,a,S_j)\, U(S_j)]$$

Maximum Expected Utility (MEU)

politica optima

$$\pi^*(s) = \arg\max_a [R(s,a) + \delta \Sigma_{s'} T(s,a,s')\, U^*(s')]$$

Policy iteration pt MPD

Fie $\pi_t(S)$ actiunea selectata in starea **S** la iteratia **t**

1. t=0
2. Alege o politica oarecare π_0 (aleator)
3. Pentru fiecare S_i, calculeaza $U^0(S_i)$ recompensa pe termen lung obtinuta pornind din starea S_i, folosind π_0

$$U^0(S_i) = R(S_i,a) + \delta \Sigma_{j=1,n} T(S_i, \pi_0(S_i),S_j) U^0(S_j)$$

(Pe baza ei se va calcula

$$\pi_t(S_i) = \arg\max_a[R(S_i,a) + \delta \Sigma_{j=1,n} T(S_i, a, S_j) U^0(S_j)]$$)

Policy iteration pt MPD

4. repeta

- $t \leftarrow t + 1$
- Calculeaza politica $\pi_t(s)$

$$\pi_t(S_i) = \arg\max_a [R(S_i,a) + \delta \Sigma_{j=1,n} T(S_i, a, S_j)\, U^{t-1}(S_j)]$$

- Calculeaza recompensa pe termen lung obtinuta pornind din starea s, folosind π_t

$$U^t(S_i) = R(S_i,a) + \delta \Sigma_{j=1,n} (T(S_i, \pi_t(S_i),S_j) * U^{t-1}(S_j))$$

pana $\pi_t = \pi_{t-1}$

5. Reinforcement learning

- **Daca agentul are un model complet al mediului** (stie MDP) – determina utilitatea starilor pentru a afla politica optima sau direct politica
- **Daca agentul NU are un model complet al mediului -** exploreaza mediul si utilizeaza recompensa pentru **a invata utilitati ale starilor (sau utilitati ale perechilor stare-actiune) sau politici** pentru acest mediu – **Reinfocement Learning**

RL – Metode

- **Invatarea bazata pe model (model-based learning)** – incearca sa invete un model explicit al mediului si foloseste modelul invatat pentru a gasi utilitatea starilor sau politica optima
- **Invatare fara model (model-free learning)** – invata direct utilitatea starilor sau a perechilor stare-actiune si obtine politica optima
- **Predictie / Evaluare**
  - Agentul urmeaza o politica si invata utilitatea starilor sau a perechilor stare-actiune
- **Control**
  - Agentul trebuie sa invete si ce actiuni sa faca

Model-based learning

- **Valoarea unei stari urmand o politica π este utiltatea acelei stari** (long term discounted reward)
- Folosim ec. Bellman
- $\mathbf{U(s) = \max_a [R(s,a) + \delta \Sigma_{s'} T(s,a,s') U(s')]}$
- DAR agentul NU cunoaste $T(S_i,a,S_j)$
- Incearca sa estimeze T

Pentru a invata, exploreaza mediul

- Ce se stie prin explorare?
- O secventa de stari si recompensa asociata, de ex.

$$S_1(R=0) \rightarrow S_2(R=0) \rightarrow S_3(R=4) \rightarrow$$

$$S_4\ (R=0) \rightarrow S_5\ (R=0)$$

- Pe baza acestei secvente sa se estimeze $U^*(S_1)$, $U^*(S_2)$ …
- La MDP stiam probabilitatile de tranzitie intre stari pt a calcula U*
- Aici nu le stim; trebuie sa calculam U* numai pe baza observatiilor pe unde trece si ce recompensa primeste

5.1 Invatare ADP

- **ADP – Adaptive Dynamic programming**
- Model-based
- Metoda Monte Carlo
- Evalueaza utilitatile prin explorare
- Politica agentului este fixa: in starea **s** se executa actiunea $\boldsymbol{\pi(s)}$: $\mathbf{S \rightarrow A}$
- Agentul invata cat de buna este o politica, adica $U^{\pi}(S)$
- Aplicata la taskuri episodice (modelul orizontului finit)

- Estimeaza probabilitatile tranzitiilor T(s,a,s') pe baza frecventei cu care se ajunge in **s'** dupa ce se executa **s** in **a**

  exp1: $s_1 \ldots s_3 \rightarrow^a s_4 \ldots$

  exp2: $s_1 \ldots s_3 \rightarrow^a s_4 \ldots$

  exp3: $s_1 \ldots s_3 \rightarrow^a s_5 \ldots$

  $$T(s3, a, s4) = 2/3$$

- Utilizeaza Bellman pentru politica fixa

$$\mathbf{U^{\pi}(s) = R(s,a) + \delta\ (\Sigma_{s'} T(s, \pi(s), s')\ U^{\pi}(s'))}$$

- Se utilizeaza pentru un comportament episodic al agentului (modelul orizontului finit)

ADP (Adaptive Dynamic Programming)

function ADP-Agent(perceptie) **returns** o actiune

inputs: perceptie care indica starea curenta **s'** si recompensa **r'**

variable: π, a politica fixa

mdp, MDP cu model T, recompense R, atenuare δ

U, o tabela de utilitati, initial vida

N_{sa}, o tabela de frecvente pentru perechi **stare-actiune**, initial zero

$N_{s'|as}$ o tabela de frecvente a **iesilor** pentru perechi **stare-actiune**, initial zero

s, a, starea si actiunea anterioara, initial nule

if s' este stare noua **then** U[s'] $\leftarrow$ r', R[s'] $\leftarrow$ r'

if s nu este nula **then**

incrementeaza N_{sa}[s,a] si $N_{s'|sa}$[s',s, a]

for fiecare stare **t** a.i. $N_{s'|sa}$[t, s, a] <>0 **do**

T[s,a,t] $\leftarrow$ $N_{s'|sa}$[t,s,a] / N_{sa}[s,a]

U $\leftarrow$ Evaluare(π,U)

if s' este stare finala **then** **s, a** $\leftarrow$ null **else** **s, a** $\leftarrow$ s', π[s']

return a

end

Evaluare

De ex foloseste Iterarea valorii

$U^{k+1}(S_i) = \max_a(R(S_i,a) + \delta \Sigma_{j=1,n} T(S_i,a,S_j) U^k(S_j))$

5.2 Invatare TD (Temporal difference)

- **Model-free**
- Agent pasiv - politica agentului este fixa: in starea **s** se executa actiunea $\boldsymbol{\pi(s)}$: $\mathbf{S \rightarrow A}$
- Se folosesc tranzitiie observate pentru a corecta valorile starilor prin care se trece
- Foloseste estimarea valorii starii urmatoare pentru a actualiza estimarea valorii starii curente (procedura de **bootsrapping**)
- Se memoreaza tabela U^{est}
- Poate fi utilizat atat pentru taskuri episodice cat si pentru taskuri continue (modelul orizontului infinit)

Invatare TD (Temporal difference)

exp1: $s_0 \rightarrow \ldots . s_i \rightarrow s_j \ldots$ si observam $s \rightarrow s'$

- Actualizam $\mathbf{U^{\pi}(s)}$ in functie de $\mathbf{R(s)}$ si $\boldsymbol{\delta}\ \mathbf{U^{\pi}(s')}$
- Valoarea estimata a starii curente este actualizata a.i sa fie mai aproape de valoarea estimata a starilor viitoare
- Estimeaza valoarea unei stari pentru o politica data dar nu imbunatateste politica
- Metoda TD cea mai simpla TD(0) / one step TD

- Se introduce un parametru - $\boldsymbol{\alpha}$ ***rata de invatare***

$$\mathbf{U^{\pi}(s) = U^{\pi}(s) + \alpha_t(R(s) + \delta\ U^{\pi}(s') - U^{\pi}(s))}$$

- $\boldsymbol{\alpha}$ estimeaza eroarea intre valoarea starii curente si valoarea reala a acelei stari, pentru o politica data (un fel de aproximare stohastica)

Temporal difference learning

$$U^{\pi}(s) = U^{\pi}(s) + \alpha_t \underbrace{(R(s) + \delta\, U^{\pi}(s')}_{\text{TD target}} - U^{\pi}(s))$$

- TD error = $R(s) + \delta\, U^{\pi}(s') - U^{\pi}(s))$
- α sa descreasca lent in timp (α_t - scade pe masura ce numarul de vizitari ale unei stari creste)
- $\Sigma_{t=1,\infty}\, \alpha_t = \infty$
- $\Sigma_{t=1,\infty}\, (\alpha_t)^2 < \infty$

Temporal difference learning

function TD-Agent(perceptie) **returns** o actiune
inputs: perceptie care indica starea curenta **s'** si recompensa **r'**
variable: **π,** o politica fixa
    U, o tabela de utilitati, initial goala
    Ns, o tabela de frecvente pentru **stari**, initial zero
    s, a, r starea, actiunea si recompensa anterioara, initial nule

if **s'** este stare noua **then** U[s'] ← r'

if **s** nu este nula **then**

    incrementeaza Ns[s]

    U[s] ← U[s] + α(Ns[s])*(r + δ U [s'] – U [s])

if **s'** este stare finala

    then **s, a, r** ← null

    else **s, a, r** ← s', π[s'], r'

return a

end

s, a, r ← s', π[s'], r'

Taskuri episodice sau continue

Temporal difference learning

- Actualizeaza estimarea pe baza altor estimari
- Bootstrapping
- Pt o politica fixa se demonstreaza ca va converge la $\mathbf{U^{\pi}(s)}$
- Pentru ca metoda sa fie convergenta, adica ca $U^{\pi}(S) \rightarrow U^{*}(S)$ pentru orice stare, este necesar ca toate starile sa fie vizitate la fel de des
- Nu necesita un model
- Mediul ofera conexiunea intre stari adiacente sub forma tranzitiilor observate
- TD poate fi implementata on-line

ADP vs TD

- ADP si TD – ambele incearca sa modifice estimarea utilitatii a.i. fiecare stare sa fie "in concordanta" cu starea ei succesoare
- TD mentine concordanta starii curente numai cu starea urmatoare
- ADP mentine concordanta cu toti succesorii posibili ai starii curente, ponderat cu probabilitati
- TD face o modificare pe ciclu
- ADP face mai multe modificari pe ciclu a.i. sa mentina consistenta utilitatilor estimate cu mediul
- TD – taskuri continue sau episodice
- ADP – taskuri episodice (are stari finale, explorarea trebuie reluata cu pastrarea valorilor)

5.3 Q-learning

- **Model-free**, Agent activ
- Invata utilitati ale perechilor actiune-valoare in loc de utilitati ale starilor
- **Functie actiune-valoare** = atribuie o utilitate estimata executarii unei actiuni intr-o stare
- Q: A x S $\rightarrow$ U
- **Q(a, s) –** suma estimata atenuata a recompenselor viitoare obtinute incepand din starea **s**, alegerea actiunii **a** si urmarind apoi o *politica optima*
- Valorile Q sunt legate de utilitatea starilor astfel

$$\mathbf{U(s) = \max_a Q(a, s)}$$

Q-learning

- $U(s) = \max_a Q(a, s)$
- Bellman

  $$U(s) = \max_a [R(s,a) + \delta \Sigma_{s'} T(s,a,s') U(s')]$$
- Daca am extrapola ec Bellman, am obtine

  $$Q(a,s) = R(s,a) + \delta \Sigma_{s'} (T(s, a, s') \max_{a'} Q(a', s'))$$

  Dar necesita un model, deci nu se poate folosi
- Agentul invata dar NU are un model al mediului
- **Solutie: Se utilizeaza aceeasi abordare ca la TD**
- In loc de U, mentine o tabela cu valorile Q

Q-learning

In TD am utilizat

$U^{\pi}(s) = U^{\pi}(s) + \alpha_t(R(s,a) + \delta\, U^{\pi}(s') - U^{\pi}(s))$

In Q-learning se utilzeaza

$\mathbf{Q(a,s) = Q(a,s) + \alpha_t(R(s,a) + \delta\, \max_{a'} Q(a', s') - Q(a,s))}$

calculata dupa fiecare tranzitie din s in s'.

α - viteza de invatare

Q-learning

function Q-Learning-Agent(perceptie) **returns** o actiune

inputs: percept, o perceptie ce indica starea curenta s′ si recompensa r′

variable: **Q,** o matrice cu valori pentru perechi stare actiune, initi. arbitrar

Nsa, o tabela de frecvente pentru perechi stare-actiune

s, a, r starea, actiunea si recompensa anterioare

if **s** <> null **then**

incrementeaza Nsa[s,a]

$Q[a,s] \leftarrow Q[a,s] + \alpha(Nsa[s,a]) * (r + \delta \max_{a'} Q[a',s'] - Q[a,s])$

s, a, r $\leftarrow$ s′, $\text{argmax}_{a'}$ Q[a′, s ′], r′

if s′ este stare finala **then** **s, a, r** $\leftarrow$ null

else **s, a, r** $\leftarrow$ s′, $\text{argmax}_{a'}$ Q[a′, s ′], r′

return a

end

s, a, r $\leftarrow$ s′, **f**($\text{argmax}_{a'}$ Q[a′, s′], a′), r′

explorare - exploatare

$\forall s \in S \ \pi(s) = \text{argmax}_a Q(a,s)$

Explorare vs exploatare

$$Q(a,s) = Q(a,s) + \alpha_t(R(s,a) + \delta \max_{a'} Q(a', s') - Q(a,s))$$

ε-greedy policy: $\text{argmax}_{a'} Q[a',s']$ cu prob (1-ε) altfel un a' aleatory, cu 0< ε <1

$s, a, r \leftarrow s', \mathbf{f}(\text{argmax}_{a'} Q[a', s'], a'), r'$

Varianta 1 - ε descreste liniar in timp

Varianta 2

Distributie Boltzman prin care se controleaza explorare vs. exploatare printr-un parametru de temperatura τ (softmax policy)

$$\varepsilon = \frac{e^{Q(s,a)/\tau}}{\sum_{a' \in A} e^{Q(s,a')/\tau}}$$

Viteza de invatare

$$Q(a,s) = Q(a,s) + \alpha_t(R(s,a) + \delta \max_{a'} Q(a', s') - Q(a,s))$$

- Aceleasi conditii de convergenta
  - Toate perechile stare-actiune sunt vizitate la fel de des
  - α_t descreste lent in timp
  - $\Sigma_{t=1,\infty} \alpha_t = \infty$
  - $\Sigma_{t=1,\infty} (\alpha_t)^2 < \infty$

Comentariu despre politici

- **On-policy learning**
- **Off-policy learning**

5.4 SARSA

In TD am utilizat

$U^{\pi}(s) = U^{\pi}(s) + \alpha_t(R(s,a) + \delta\, U^{\pi}(s') - U^{\pi}(s))$

- **SARSA** (s, a, r, s',a')

$\mathbf{Q(a,s) \leftarrow Q(a,s) + \alpha(R(s,a) + \delta\, Q(a', s') - Q(a,s))}$

- Extindere directa a TD Learning
- Este on-policy learning

Comparatie Q-learning cu SARSA

- **Q-learning – off-policy learning**

  Estimeaza direct valoarea politicii in timp ce actioneaza conform unei alte politici
- Mentine estimari Q ale perechilor stare-actiune si le foloseste pentru a gasi valoarea celei mai bune actiuni urmatoare

$$Q(a,s) \leftarrow Q(a,s) + \alpha(R(s,a) + \delta \max_{a'} Q(a', s') - Q(a,s))$$

- **SARSA – on-policy learning**
- estimeaza valoarea comportarii/politicii curente si apoi actualizeaza aceasta politica incercand sa estimeze

$$Q(a,s) \leftarrow Q(a,s) + \alpha(R(s,a) + \delta Q(a', s') - Q(a,s))$$

Cliff Walking – **comparatie SARSA vs Q-learning**
(exemplu Sutton)

Q-learning cu
ε-greedy policy
ε=0.1
fara discount

5.5 TD(n)

- Extinderea TD la mai multi pasi
- TD(0) – one-step – fac actualizari 1 pas inainte
- TD(n) – fac actualizari mai multi pasi inainte

$$U(s_t) \leftarrow U(s_t) + \alpha(R(s_t,a) + \delta U^{\pi}(s_{t+1}) + \delta^2 U^{\pi}(s_{t+2}) + \ldots + \delta^n U^{\pi}(s_{t+n}) - U^{\pi}(s))$$

- La fel pentru Q-learning
- $Q(a_t,s_t) \leftarrow Q(a_t,s_t) + \alpha(R(s_t,a) + \delta \max_{at+1} Q(a_{t+1},s_{t+1}) + \delta^2 \max_{at+2} Q(a_{t+2},s_{t+2}) + \ldots\ldots - Q(a,s))$

Double Q-Learning

- Utilizeaza 2 modele de Q-learning, Q1 si Q2, si foloseste unul ca target pentru celalalt

---

Initialize $Q_1(s,a)$ and $Q_2(s,a), \forall s \in S, a \in A$ $t = 0$, initial state $s_t = s_0$

loop

Select a_t using ϵ-greedy $\pi(s) = \arg\max_a Q_1(s_t,a) + Q_2(s_t,a)$

Observe (r_t, s_{t+1})

if (with 0.5 probability True) **then**

$$Q_1(s_t,a_t) \leftarrow Q_1(s_t,a_t) + \alpha(r_t + Q_1(s_{t+1}, \arg\max_{a'} Q_2(s_{t+1},a')) - Q_1(s_t,a_t))$$

else

$$Q_2(s_t,a_t) \leftarrow Q_2(s_t,a_t) + \alpha(r_t + Q_2(s_{t+1}, \arg\max_{a'} Q_1(s_{t+1},a')) - Q_2(s_t,a_t))$$

end if

$t = t + 1$

end loop

7. Generalizare RL

- Problema invatarii in spatii mari de stari – f multe stari
- Tehnici de generalizare – stocare compacta a ceea ce s-a invatat si gruparea starilor "similare"
- U(stare) = U(stari similare)

Problema unui numar mare de stari - RL

- Metode tabulare
- Generalizare prin Functii de aproximare
  - Combinatie liniara de caracteristici
  - Retele neurale
  - Arbori de decizie
  - Nearest neighbors
  - Transformate fourier

Invatare automata

Universitatea Politehnica Bucuresti
Anul universitar 2021-2022

Adina Magda Florea

Curs nr. 8

- Deep Q-Learning

Aproximarea functiei valoare

- Value Function Approximation (VFA)
- Reprezentarea functiei valoare (a unei stari – V(s)/U(s) sau a unei perechi stare-actiune Q(s,a)) printr-o functie parametrizata (in loc de o tabela)
- Generalizare la stari care nu au fost vizitate sau nu au fost vizitate suficient de des

Aproximarea functiei valoare

- Reprezinta starile ca o multime de caracteristici **x(s)** impreuna cu un set de parametrii **w**
- Gaseste parametrii **w** prin minimizarea erorii (loss) intre valoarea *V(s)* sau *Q(s,a)* si valoarea functiei de aproximare $\hat{V}(s;w)$ sau $\hat{Q}(s,a;w)$

$$\begin{bmatrix} x_1(s) \\ .. \\ x_n(s) \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} w_1 \\ .. \\ w_n \end{bmatrix}^T$$

Aproximarea functiei valoare

- S-a incercat mult timp cu VFA liniare
- Probleme:
  - reprezentarea caracteristicilor
  - VFA + off-policy+ bootstrapping poate diverge
- NN multi-strat au fost utilizate in RL inca din anii 90, de ex in jocul de table

Utlizarea DNN in RL

- Google Deep Mind – a aratat ca o DNN poate automatize procesul de reprezentare a caracteristicilor (2013, 2015)
- DQN – Q-learning with CNN – 49 de jocuri Atari prin interactiunea cu un emulator de jocuri

Pong, Breakout, Space Invaders, Sea Quest, Beam Rider

Deep Q-Networks (DQN)

- Utilizarea unei aproximari functionale pentru a estima valoarea Q optima a unei actiuni dintr-o stare
- Utilizeaza o retea CNN care sa indice cea mai buna actiune de efectuat

Deep Q-Networks

- Eroarea retelei este obtinuta prin compararea valorii Q cu valoarea target

$$Q(s_t, a_t) \leftarrow Q(s_t, a_t) + \alpha(\underbrace{r_t + \gamma \max_{a'} Q(s_{t+1}, a')}_{\text{target}} - Q(s_t, a_t))$$

Reprezentare

- 49 de jocuri Atari 2600 folosing Arcade Learning Environment
- Utilizeaza pt toate jocurile aceeasi arhitectura de retea, aceleasi valori de parametrii (dim pas, atenuare, explorare/exploatare, etc.)
- Intrarea este creata numai pe baza imaginilor din jocul video
- Pt fiecare joc invatarea s-a facut prin interactiune cu 50 de milioane de frames

Reprezentare

- Un frame – imagine de 210x160 de pixeli cu 128 culori la 60Hz, transformata intr-o matrice de 84x84 de pixeli (luminozitate)
- O stare reprezentata de 4 frame-uri consecutive (stack 4 most recent frames)
- Intrarea retelei este deci 84 x 84 x 4 - starea ***s***
- Iesirea retelei – valori ***Q(s,a)*** pentru fiecare actiune posibila (miscare joystick), intre 3 si 16
- Recompensa este schimbarea scorului la fiecare pas
- Episoade finite, cate un episode pt fiecare joc jucat, cu momente de timp de la 0 la T
- Recompensa atenuata cu γ

Arhitectura retelei

1 network, outputs Q value for each action

"*Human-level control through deep reinforcement learning*", Mnih et al, 2015

Arhitectura retelei

- Primul strat este de convolutie cu 16 filtre de 8 x 8, stride 4 si ReLU
- Al doilea strat tot de convolutie cu 32 de filtre 4 x 4, stride 2 si ReLU
- Un strat ascuns fully-connected de 256 ReLU
- Stratul de iesire – fully connected cu 1 iesire pt fiecare actiune valida intr-un joc

Functionare

- Utilizeaza Memory replay buffer (s, a, r, s')

- Utilizeaza MSE si SGD

$$J(\mathbf{w}) = \mathbb{E}_{(s_t, a_t, r_t, s_{t+1})}[(\underbrace{y_t^{DQN}}_{\text{target}} - \hat{q}(s_t, a_t, \mathbf{w}))^2]$$

$$y_t^{DQN} = r_t + \gamma \max_{a'} \hat{q}(s_{t+1}, a', \mathbf{w}^-)$$

Instabilitate in Q-Leraning

- Q-learning este instabil sau chiar divergent daca se utilizeaza un VFA neliniar pt a reprezenta fct Q sau poate ajunge in minime locale
- Aceasta instabilitate are mai multe cauze:
  - corelarea in secventa de frames (observatii)
  - actualizari mici ale valorii Q pot schimba semnificativ politica si deci schimba distributia datelor
  - corelarea intre valorile actiunilor si valorile target
- pentru a le elimina/minimiza, DQN foloseste
  - Experience replay (replay buffer)
  - 2 retele neurale

Experience replay

- Esantioanele de comportare successive (s, a, r, s')

sunt intens corelate

- Pentru a elimina aceasta corelare, se tin minte "snapshots" ale jocului in replay buffer (dim aprox 1 mil) din care se aleg stochastic minibatch-uri pe care se aplica GD
- In acest fel se elimina corelarea

Q targets fixe

- Mentine fixe ponderile target-ului pentru mai multe iteratii

$$y_t^{DQN} = r_t + \gamma \max_{a'} \hat{q}(s_{t+1}, a', \mathbf{w}^-)$$

2 retele CNN si CNN$^-$

Reteaua target utilizeaza un set diferit de ponderi fata de cele care sunt actualizate

2 randuri de parametrii

w^- - parametrii utilizati in target

w - parametrii care se actualizeaza

Minimizare J $(Q^s \rightarrow r + Q^{s'})$

Functionare

$$J(\mathbf{w}) = \mathbb{E}_{(s_t, a_t, r_t, s_{t+1})}[(y_t^{DQN} - \hat{q}(s_t, a_t, \mathbf{w}))^2]$$

$$y_t^{DQN} = r_t + \gamma \max_{a'} \hat{q}(s_{t+1}, a', \mathbf{w}^-)$$

- Calculeaza valorile target
  - Obtine un esantion din buffer $(s, a, r, s') \sim \mathcal{D}$:
  - calculeaza valoarea target pe baza acestui esantion

$$r + \gamma \max_{a'} \hat{Q}(s', a'; \boldsymbol{w}^-)$$

- Foloseste SGD pentru actualizarea ponderilor retelei

$$\Delta \boldsymbol{w} = \alpha(r + \gamma \max_{a'} \hat{Q}(s', a'; \boldsymbol{w}^-) - \hat{Q}(s, a; \boldsymbol{w}))\nabla_{\boldsymbol{w}} \hat{Q}(s, a; \boldsymbol{w})$$

Functionare

- Pasteaza ponderile target w^- fixe pentru mai multi pasi (de ex 50, 100) pentru a imbunatati stabilitatea
- Acest lucru face target mai stabila si reduce zgomotul din target

Ponderile din target w^- sunt actualizate din cand in la cele din reteaua Q - w

$$w^- = w$$

Deep Q-Learning DQN

Initializeaza D - replay memory - cu o capacitate fixa

Initializeaza functia $\hat{Q}$ cu valori aleatoare ale ponderilor w

Initializeaza functia target $\hat{Q}$ cu valori $w^- = w$

pentru episod=1,M **repeta**

observa imaginea initiala x_1 si preproceseaza pentru a obtine s_1

pentru t=1,T **repeta**

selecteaza o actiune $a_t = \begin{cases} \text{aleator cu probabilitatea } \varepsilon \\ argmax_a \hat{Q}(s,a,w) \text{ cu prob } 1-\varepsilon \end{cases}$

executa a_t in emulator si obtine recompensa r_t si imaginea x_{t+1}

preproceseaza s_t, x_{t+1} pentru a obtine s_{t+1} si memoreaza (s_t, a_t, r_t, s_{t+1}) in D

selecteaza uniform un minibatch de N elem (s_j, a_j, r_j, s_{j+1}) din D

daca episodul se termina la pasul j+1 **atunci** $y_j = r_j$

altfel $\boldsymbol{y_j = r_j + \gamma max_{a'} \hat{Q}(s_{j+1}, a', w^-)}$

executa SGD cu eroarea $J(w) = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N}(y_j - \hat{Q}(s_j, a_j, w))^2$ pentru w

dupa fiecare C pasi actualizeaza $w^- = w$

Imbunatatiri

- Politica de management a buffer-ului

- Double DQNs (2016)
- In DQN standard se folosesc aceleasi valori pentru a selecta si a evalua o actiune.

$$y_t^{DQN} = r_t + \gamma \max_{a'} \hat{q}(s_{t+1}, a', \mathbf{w}^-)$$

- Acest lucru poate conduce la o supraestimare a valorilor
- Pentru a evita acest lucru, se poate decupla selectia actiunii de evaluarea actiunii
- Aceasta este idea din Double DQN

Double DQN

- In DDQN se invata 2 valori de functii prin actualizarea aleatoare a 2 valori de functii la fiecare experienta a.i. se pastreaza 2 seturi de ponderi
- La fiecare actualizare, un set de ponderi este utilizat pentru a determina politica greedy si celalat set de ponderi pentru a determina valoarea.
- Selectarea unei actiuni in argmax este datorata ponderilor **w**, ceea ce insemana ca, la fel ca in Q-Learning, se estimeaza valoarea politicii greedy in functie de valorile curente definite de **w**.
- In schimb se folosesc celelate ponderi $\mathbf{w}^-$ pentru o evaluare corecta a acestei politici.

$$y_t^{DQN} = r_t + \gamma \max_{a'} \hat{q}(s_{t+1}, a', \mathbf{w}^-)$$

$$\Delta \boldsymbol{w} = \alpha(r + \gamma \overbrace{\hat{Q}(\underbrace{\arg\max_{a'} \hat{Q}(s', a'; \boldsymbol{w})}_{\text{Action selection: } \boldsymbol{w}}; \boldsymbol{w}^-)}^{\text{Action evaluation: } \boldsymbol{w}^-} - \hat{Q}(s, a; \boldsymbol{w}))$$

Invatare automata

Universitatea Politehnica Bucuresti

Anul universitar 2021-2022

Adina Magda Florea

Curs 9

Algoritmi genetici

- **Introducere**
- **Schema de baza**
- **Modelare probleme**
- **Exemplu**
- **Selectie**
- **Recombinare**
- **Mutatie**
- **Implementare paralela AG**

1. Introducere

- GA - USA, J. H. Holland (1975)
- Algoritmi evolutivi – Germania, I. Rechenberg, H.-P. Schwefel (1975-1980)
- Programare genetica (2000) J. Koza

- **Optimizare**
- **Modele economice**
- **Modele ecologice**
- **Modele ale sistemelor sociale**
- **Invatare automata**

Introductere - cont

- Opereaza asupra unei populatii de indivizi = solutii potentiale – aplica principiul supravietuirii pe baza de adaptare (fitness)
- Fiecare generatie – o noua aproximatie a solutiei
- Evolutia unei populatii de indivizi mai bine adaptati mediului
- Modeleaza procese naturale: selectie, recombinare, mutatie, migrare, localizare
- Populatie de indivizi – cautare paralela

2. Schema de baza

3. Modelare probleme

Populatie initiala

- Stabileste reprezentare – gena – individ
- Stabileste numar de indivizi in populatie
- Stabileste functia de evaluare (obiectiv)
- Populatia initiala (genele) creata aleator

Selectie

- **Selectie** – extragerea unui subset de gene dintr-o populatie existenta in fct de o definitie a calitatii - **functia de evaluare**
- Determina indivizii selectati pt recombinare si cati **descendenti** (offsprings) produce fiecare individ

Modelare probleme

Criteriul de oprire

- solutie care satisface criteriul
- numar de generatii
- buget
- platou pt cel mai bun fitness

Multipopulation GAs

- Rezultate mai bune - **subpopulatii**
- Fiecare populatie evolueaza separat
- Indivizi sunt schimbati dupa un numar de generatii

3.1 Selectie

(1) Primul pas: atribuire fitness

- atribuire proportionala
- atribuire bazata pe rang

(2) Selectia efectiva: parintii sunt selectati in fct de fitness pe baza unuia din algoritmii:

- **roulette-wheel selection** (selectie ruleta)
- **stochastic universal sampling** (esantionare universala stohastica)
- **local selection** (selectie locala)
- **tournament selection** (selectie turneu)
- **proportional selection** (selectie proportionala)

3.2 Reinserare

- Offspring – daca se produc mai putini indivizi sau mai putini copii atunci indivizi suplimentari trebuie reinserati in noua populatie
- Algoritmul de selectie determina schema de reinserare (in general)
- **reinserare globala** – in toata populatia, de ex. pt. roulette-wheel selection, stochastic universal sampling
- **reinserare locala** pt selectie locala

3.3 Crossover/Recombination

- Recombinarea produce noi indivizi prin combinarea informatiei din parinti (parents - mating population).
- Diverse scheme de recombinare
- ***O posibilitate*** – imperechere aleatoare
- La fel cu ***Crossing Over*** din genetica

1. *Un procent* P_M din indivizii noii populati sunt selectati si se imperecheaza aleator
2. Un *crossover point* este selectat pentru fiecare pereche (acelasi sau diferit cu probabilitate)
3. Informatia este schimbata intre cei doi indivizi pe baza pct de crossover

Crossover

0 1 1 1 0 0 0 1 1 0 1 0 1 1 0 1
0 1 0 1 1 0 0 1 1 0 1 1 1 1 1 1
Crossover Point
0 1 1 1 0 0 0 1 1 0 1 1 1 1 1 1
0 1 0 1 1 0 0 1 1 0 1 0 1 1 0 1

3.4 Mutatie

- Offspring - mutatie
- Mutatie cu perturbatii mici aleatoare
- Diverse forme de mutatie, depind de reprezentare
- **Mutatie** – ***explorare*** *vs exploatare*
- Schema simpla
  - *Fiecare bit are o probabilitate de mutatie*

Mutatie

Efectul mutatiei si a selectiei

4. Selectia in detaliu

- Primul pas este **atribuirea de fitness** (A)
  - Atribuire directa pe baza functiei obiectiv SAU
  - Atribuire pe baza unui mecanism (A1, A2)
- Fiecare individ din populatie primeste o valoare de fitness
- Pe baza valorii de fitness se realizeaza **selectia** (S) dupa o schema de selectie (S1, S2, S3, S4)

A1. Atribuire fitness proportionala

- *Fiecare gena are un fitness asociat*
- Se calculeaza fitness mediu al populatiei
- Fiecare individ va fi copiat in noua populatie in fct de fitness comparat cu fitness mediu
- *fitness mediu 5.76, fitness individ 20.21 – se copiaza de 3 ori*
- Indivizii cu fitness egal sau sub medie se ignora
- Noua populatie – poate fi mai mica
- Noua populatie se completeaza cu indivizi selectati aleator din vechea populatie

A2. Atribuire fitness bazata pe rang

- Fitness-ul atribuit fiecarui individ depinde numai de pozitia lui intre indivizii din populatie
- Pozitia unui individ in populatie depinde de functia obiectiv
- *Pos* = 1 – cel mai putin bun
- *Pos* = *Nind* – cel mai bun
- Populatia este ordonata in functie de fitness

Atribuire fitness bazata pe rang

- *Nind* – numarul de indivizi din populatie
- *Pos* – pozitia individului in populatie (cel mai prost *Pos*=1, cel mai bun *Pos*=*Nind*)
- *SP* – presiunea de selectie - fitness maxim impartit la fitness mediu – indica puterea unui mechanism de selectie

Rang liniar

Fitness(*Pos*) = 2 - *SP* + 2*(*SP* - 1)*(*Pos* - 1) / (*Nind* - 1)

- Rangul liniar permite valori SP in (1.0, 2.0].

Atribuire fitness bazata pe rang

Rang neliniar:

$$\mathbf{Fitness}(\boldsymbol{Pos}) = \boldsymbol{Nind} * \boldsymbol{X}^{(\boldsymbol{Pos} - 1)} / \Sigma_{\boldsymbol{i} = 1, \boldsymbol{Nind}} (\boldsymbol{X}^{(\boldsymbol{i} - 1)})$$

- X se calculeaza ca radacina a polinomului:

$$0 = (SP - Nind) * X^{(Nind - 1)} + SP * X^{(Nind - 2)} + \ldots + SP * X + SP$$

- Rang neliniar permite valori SP in

$$[1.0, Nind - 2.0]$$

- SP mai mari

Atribuire fitness bazata pe rang

Atribuire fitness rang liniar si rang neliniar

Liniar
SP=2 $\rightarrow$ 0..2
SP = 1.5 $\rightarrow$ 0.5..1.5

Atribuire fitness bazata pe rang

- Fata de atribuirea proportionala:
  - Evita problema stagnarii in cazul in care presiunea de selectie este prea mica sau convergenta prematura genereaza o zona de cautare prea ingusta
  - Ofera un mod simplu de a controla presiunea de selectie
  - In general mai robusta
- **intensitatea de selectie**
- **pierderea diversitatii**

Atribuire fitness bazata pe rang

Proprietati

Intensitatea de selectie: $SelInt_{Rank}(SP) = (SP-1)*(1/sqrt(\pi))$.

Pierderea diversitatii: $LossDiv_{Rank}(SP) = (SP-1)/4$.

Covarianta selectiei: $SelVar_{Rank}(SP) = 1-((SP-1)^2/ \pi) = 1-SelInt_{Rank}(SP)^2$.

S1. Selectia bazata pe ruleta

"Roulette-wheel selection" sau "stochastic sampling with replacement"

11 indivizi, rang liniar si SP = 2

Nr individ	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
Valoare fitness	2.0	1.8	1.6	1.4	1.2	1.0	0.8	0.6	0.4	0.2	0.0
Probabil. de selectie	0.18	0.16	0.15	0.13	0.11	0.09	0.07	0.06	0.03	0.02	0.0

6 numere aleatoare (distribuite uniform intre 0.0 si 1.0):

- 0.81, 0.32, 0.96, 0.01, 0.65, 0.42.

6, 2, 9, 1, 5, 3

S2. Esantionare universala stohastica

- Se plaseaza pointeri la distante egale pe un interval [0..1] – atatia pointeri cati indivizi se vor selecta
- *NPointer* – numarul de indivizi care va fi selectat
- Distanta intre pointeri 1/*Npointer*
- Pozitia primului pointer este data de un numar aleator in intervalul [0..1/*NPointer*].
- Pentru 6 indivizi de selectat, distanta intre pointeri este 1/6=0.167.
- **1 numar aleator in intervalul [0, 0.167]:** 0.1.

1, 2, 3, 4, 6, 8

S3. Selectie locala

- Se selecteaza prima jumatate a populatiei aleator (sau utilizand un algoritm de selectie – esantionare stohastica sau turneu).
- Se defineste apoi o vecintate pentru fiecare individ selectat.
- Se selecteaza un alt individ pt recombinare din vecintate (best, fitness proportional, sau aleator).

Selectie locala

- Fiecare individ este intr-o vecinatate
- Structurarea populatiei
- Vecintatea – grup de indivizi care se pot recombina (potential)
- Vecintatea liniara: full si half ring

Selectie locala

Selectie locala

- Distanta de izolare intre indivizi
- Cu cat mai mica vecintatea, cu atat mai mare izolarea
- Vecintati care se suprapun – apare transmisie de caracteristici
- Dimensiunea vecinatatii determina viteza de propagare
- Propagare rapida vs mentinere diversitate mare
- Diversitate mare – previne convergenta prematura

S4. Selectie turneu

- Un numar *Tour* de indivizi din populatie este selectat aleator si cel mai bun individ dintre acestia este selectat ca parinte
- Procesul se repeta pt cati indivizi dorim sa selectam
- Parametrul pt dimensiunea turneului este *Tour*.
- *Tour* - valori intre 2 .. *Nind*
- Relatie intre *Tour* si intensitatea de selectie

Dimensiune turne	1	2	3	5	10	30
Intensitate selectie	0	0.56	0.85	1.15	1.53	2.04

Estimeaza valoare medie a fitness-ului populatiei dupa aplicarea unei metode de selectie

Selectie turneu

- **Intensitatea de selectie:**

  $SelInt_{Tour}(Tour) = sqrt(2*(log(Tour)-log(sqrt(4.14*log(Tour)))))$

- **Pierderea diversitatii:**

  $LossDiv_{Tour}(Tour) = Tour^{-(1/(Tour-1))} - Tour^{-(Tour/(Tour-1))}$

  (Aprox 50% din populatie se pierde pt Tour=5).

- **Covarianta selectiei:**

  $SelVar_{Tour}(Tour) = 1- 0.096*log(1+7.11*(Tour-1))$, $SelVar_{Tour}(2) = 1-1/\pi$

6. Crossover / recombination

- Produce noi indivizi prin recombinarea informatei din parinti
- Reprezentari binare
  - binara
  - multipunct
  - uniforma
- Reprezentari intregi/reale
  - discreta
  - reala intermediara
  - liniara

6.1 Recombinare binara

- Pozitia de crossover selectata aleator ➔ se produc 2 descendenti

Recombinare binara

- Exemplu
- **individual 1:** 0 1 1 1 0 | 0 1 1 0 1 0
- **individual 2:** 1 0 1 0 1 | 1 0 0 1 0 1

- pozitie crossover = **5**
- Se creaza 2 indivizi noi:
- **offspring 1:** 0 1 1 1 0 | 1 0 0 1 0 1
- **offspring 2:** 1 0 1 0 1 | 0 1 1 0 1 0

6.2 Recombinare multi-punct

- *m* pozitii de crossover k_i

- ***individual 1:*** 0 1 1 1 0 0 1 1 0 1 0
- ***individual 2:*** 1 0 1 0 1 1 0 0 1 0 1
- pos. cross (m=3) 2 6 10
- **offspring 1:** 0 1| 1 0 1 1| 0 1 1 1| 1
- **offspring 2:** 1 0| 1 1 0 0| 0 0 1 0| 0

6.3 Recombinare uniforma

- Generalizeaza binara simpla si multipunct
- **Crossover mask** – aceeasi dimensiune cu a individului;
- creata aleator si paritatea bitilor din masca indica ce parinte va oferi descendentilor bitul respectiv
- *individual 1:* 0 1 1 1 0 0 1 1 0 1 0
- *individual 2:* 1 0 1 0 1 1 0 0 1 0 1

  mask 1: 0 1 1 0 0 0 1 1 0 1 0

  mask 2: 1 0 0 1 1 1 0 0 1 0 1 (inversa a mask 1)

  In masca 1 – individ 1, 0 – individ 2
- *offspring 1:* 1 1 1 0 1 1 1 1 1 1 1
- *offspring 2:* 0 0 1 1 0 0 0 0 0 0 0
- Spears and De Jong (1991) – parametrizare prin asocierea unei probabilitati

6.4 Recombinare reala discreta

Recombinare discreta

- Schimb de valori reale intre indivizi.
- individual 1: 12 25 5
- individual 2: 123 4 34
- Pt fiecare valoare, parintele care contribuie este ales aleator cu probabilitati egale
- sample 1: 2 2 1
- sample 2: 1 2 1
- Dupa recombinare:
- offspring 1: 123 4 5
- offspring 2: 12 4 5

Recombinare reala discreta

Recombinare discreta

- Pozitiile posibile ale descendentilor

- Poate fi utilizata cu orice valori (binare, reale or simboluri).

Recombinare reala intermediara

Recombinare reala intermediara

- Numai pt valori reale
- Valorile din descendenti alese in jurul valorilor din parinti

- **Regula:**

  offspring = parent 1 + Alpha (parent 2 - parent 1)

  unde Alpha este un factor de scalare ales aleator in intervalul [-*d*, 1 + *d*].

- *d* = 0 sau *d* > 0. O valoare buna d = 0.25.
- Fiecare valoare din descendenti este rezultatul combinarii parintilor cu o noua Alpha pt fiecare variabila

Recombinare reala intermediara

Recombinare reala intermediara

- individual 1: 12 25 5
- individual 2: 123 4 34

Valorile Alpha sunt:

- sample 1: 0.5 1.1 -0.1
- sample 2: 0.1 0.8 0.5
- Indivizi noi

offspring = parent 1 + Alpha (parent 2 - parent 1)

- offspring 1: 67.5 1.9 2.1
- offspring 2: 23.1 8.2 19.5

Recombinare reala intermediara

Recombinare reala intermediara

- Domeniul de valori ale descendentilor fata de cel al parintilor

- Repartizare descendenti dupa recombinare intermediara

Recombinare reala liniara

Recombinare liniara

- Similara cu cea intermediara dar se foloseste un singur Alpha.

offspring = parent 1 + Alpha (parent 2 - parent 1)

- individual 1: 12 25 5
- individual 2: 123 4 34

Valorile Alpha sunt:

- sample 1: 0.5
- sample 2: 0.1

Indivizii noi:

- offspring 1: 67.5 14.5 19.5
- offspring 2: 23.1 22.9 7.9

Recombinare reala liniara

Recombinare liniara

7. Mutatie

- Dupa recombinare – mutatia descendentilor
- Valori din descendenti sunt mutati prin inversiune (binar) sau adaugarea unor valori mici aleatoare (pasul de mutatie), cu probabilitati mici
- Probabilitatea de mutatie este invers proportionala cu dimensiunea indivizilor
- Cu cat avem indivizi mai lungi cu atat este mai mica probabilitatea de mutatie

7.1 Mutatie binara

- Schimb valorile binar
- Pt fiecare individ, bitul de mutat este ales aleator
- 11 valori, bit 4

inainte de mutatie	0	1	1	1	0	0	1	1	0	1	0
dupa mutatie	0	1	1	0	0	0	1	1	0	1	0

7.2 Mutatie cu valori reale

- **Efect**
- **mutatie**

- Dimensiune pas – dificil; poate varia in timpul evolutiei
- Mici – bine, lent; mari – mai repede
- Operator mutatie :

  mutated variable = variable ± *range*·*delta* (+ sau – cu probabililate egala)

  range = 0.5*domeniu variabila

  delta = sum($a(i)\ 2^{-i}$), $a(i)$ = 1 cu probabilitate $1/m$, altfel $a(i) = 0$.

8 Implementarea paralela a AG

- **Modelul migrator**
- **Model global - worker/farmer**

8.1 Migrare

- Modelul migrator imparte populatia in **subpopulatii**.
- Aceste populatii evolueaza independent un numar de generatii (timp de izolare)
- Dupa timpul de izolare, un numar de indivizi este distribuit intre subpopulatii = **migrare**.
- Diversitatea genetica a subpopulatiilor si schimbul de informatii intre subpopulatii depinde de:

  - numarul de indivizi schimbati = **rata migrare**

  - metoda de **selectie** a indivizilor pentru migrare

  - **schema** de migrare

Migrare

- Implementarea a modelului migrator:
  - scade timpul de prelucrare
  - necesita mai putine evaluari de functii obiectiv fata de un model cu o singura populatie

- Implementarea migrarii (paralel) pe un singur prcesor (pseudo-paralel) este buna
- In anumite cazuri se obtin rezultate mai bune

Migrare

- **Selectia** indivizilor pentru migrare:
  - aleator
  - bazata pe fitness (selectez pentru migrare cei mai buni indivizi).
- Schema de migrare intre subpopulatii:
  - intre toate subpopulatiile (topologie completa)
  - topologie inel
  - topologie vecinatate

Migrare

Topologie completa

Migrare

Schema de migrare intre subpopulatii

Migrare

Topologie inel

Topologie vecintate (implemantare 2-D)

8.2 Modelul global - worker/farmer

- Exploateaza paralelismul inerent al GA
- Worker/Farmer – schema de migrare

Invatare automata

Universitatea Politehnica Bucuresti

Anul universitar 2021-2022

Adina Magda Florea

Curs Nr. 10

Aplicatii ale algoritmilor genetici

1. **TSP cu algoritmi genetici**
2. **Utilizarea AG in planificare**
3. **Co-evolutie cooperativa**
4. **Utilizarea AG in invatarea regulilor de decizie**
5. **Programare genetica**
6. **AG pentru generarea de imagini**

1. Utilizarea GA pt:

- Problema 0/1 Knapsack
- TSP

1.1 0/1 Knapsack Problem

- Se da o multime de obiecte, fiecare cu o greutate/pondere **w(i)** si valoare/profit **p(i)**.
- Sa se determine numarul de obiecte din fiecare tip care sa se includa intr-o colectie a.i. greutatea sa fie mai mica decat o valoare data **W** si valoarea totala sa fie maxima.
- Problema 0/1 knapsack - 0 sau 1 obiecte din fiecare tip.

- *Multiobjective optimization problem*: maximizeaza profit si minimizeaza greutate
- Nu exista o (singura) solutie optima ci un set de solutii cu "trade-off" optim = multimea de solutii pt care nu se poate imbunatati un criteriu fara a se inrautati altul

0/1 Knapsack Problem

- Maximizeaza **sum(p(i)*w(i))**
- Restrictie **sum(p(i)*w(i)) <= W**
- x(i) = 0 or 1

Sir binar - lungime = numarul de obiecte.
Fiecare obiect are asociata o pozitie in sirul binar

0 – obiectul nu este in solutie

1 – obiectul este in solutie

Operatori genetici:
- selectie turneu
- one-point crossover
- bit-flip mutation.

Dimeniune populatie 100

Maximizeaza **sum(w(i)*p(i))**

Tour 2

Probabilitate mutatie: 0.01

greutate (w) 3 3 3 3 3 4 4 4 7 7 8 8 9

valoare (p) 4 4 4 **4** 4 5 5 5 **10** **10** 11 11 13

Generation 74:

No	Fit	Cromozom
00	24	000**1**0000**11**000
01	23	0110100000100
02	23	0010100101000
03	23	0110010001000
04	23	0110000110000
05	23	0101010001000
06	23	1010100000100
07	23	0110010001000
08	23	0110010010000
09	23	1010101011100
10	22	0000010011000
11	22	1010101100000
12	22	0110101100000
13	22	1010101100000
14	22	1010101100000
15	22	1010101011100
16	15	0000010001000
17	12	0110010011000
18	10	0010100101010
19	-18	0110011110011

1.2 TSP – Reprezentare problema

Functie de evaluare

- Functia de evaluare pentru *N* orase este suma distantei euclidiene

$$Fitness = \sum_{i=1}^{N} \sqrt{(x_i - x_{i-1})^2 + (y_i - y_{i-1})^2}$$

Reprezentare

- individ = reprezentare a caii, in ordinea de parcurgere a oraselor

3	0	1	4	2	5
0	5	1	4	2	3
5	1	0	3	4	2

TSP Operatori genetici

Crossover

- Nu se potrivesc operatorii traditionali la TSPs

- Inainte de crossover

  1 2 3 | 4 5 0 (parent 1)
  2 0 5 | 3 1 4 (parent 2)

- Dupa crossover

  1 2 3 | 3 1 4 (child 1)
  2 0 5 | 4 5 0 (child 2)

- Greedy Crossover - Grefenstette in 1985

TSP Operatori genetici - recombinare

Parinti **1 2 3 <u>4 5</u> 0** si **<u>4 1</u> 3 2 0 5**

- Se genereaza un descendent utilizand cel de al doilea parinte ca sablon: selectez orasul **4** ca primul oras al copilului 4 x x x x x
- Gasesc legaturi de la oras 4 in ambii parinti: (4, 5) si (4, 1). Daca distanta (4,1) mai mica decat (4,5), selectez **1** ca urmatorul oras din copil: **4 1 x x x x**
- Gasesc legaturi de la oras 1 in ambii parinti: (1, 2) si (1, 3).
- (1,2) < (1,3) – selectez **2** ca oras urmator: **4 1 2 x x x**
- (2, 3) > (2, 0) – selectez **0: 4 1 2 0 x x**
- (0, 1) < (0, 5). Deoarece 1 apare deja in copil, selectez **5** - **4 1 2 0 5 x**
- Legaturi 5 sunt (5, 0) si (5, 4), dar atat 0 cat si 4 apar in copil. Alegem un oras neselectat 3 - copil **4 1 2 0 5 3**

Aceeasi metoda pt a genera celalat descendent **1 2 0 5 4 3**

TSP Operatori genetici

Mutatie

- Nu putem folosi mutatia clasica. De ex: **1 2 3 4 5 0**, mutam 3, schimbam aleator 3 la 5 **- 1 2 5 4 5 0 -** gresit
- Selectam aleator 2 valori si le interschimbam.
- **Swap mutation: 1 2 3 4 5 0 1 5 3 4 2 0**

Selectie

- Roulette wheel selection – cel mai bun individ are probabilitatea cea mai mare de selectie dar nu este sigur selectat
- Utilizam **selectia CHC** pt a garanta ca cel mai bun individ supravietuieste (Eshelman 1991).

TSP Comportare

- CHC selection – populatie de dimensiune *N*
- Genereaza *N* copii cu roulette wheel selection
- Combina *N* parinti cu *N* copii
- Ordoneaza 2*N* indivizi in functie de fitness
- Alege cei mai buni *N* indivizi pt generatia urmatoare

Comparatie
Roulette si CHC selection

Cu selectia CHC populatia converge mai repede decat cu roulette wheel selection si performantele sunt mai bne

TSP Comportare

- Dar convergenta rapida = mai putina explorare
- Pt a preveni convergenta la un minim local, cand am obtinut convergenta populatiei, salvam cei mai buni individi si re-initializam restul populatiei aleator.
- Selectie CHC asfel modificata = selectie **R-CHC**.

Comparatie selectie CHC cu si fara re-initializare

2. Utilizarea AG in planificare

Planificarea resurselor

- Rezolvare cu AG
- Rezolvare cu co-evolutie cooperativa

Problema

- 4 resurse: A, B, C si D
- Fiecare resursa executa un numar diferit de tipuri operatii O1, O2 si O3.
- Pt fiecare resursa se cunoaste:
  - timpul pt executarea unui tip de operatie O_i
  - costul executarii operatiilor
  - capacitatea resursei

Problema

Se dau: 3 job-uri pt: 1400 unitati O1, 1200 unitati O2 si 900 unitati O3

Se cere: planificarea utilizarii resurselor a.i.:

- Cel mai redus cost de productie
- Executarea tuturor unitatilor cerute
- Sa nu se depaseasca capacitatea resurselor

Resursa	**O1** (min)	**O2** (min)	**O3** (min)	**Cost/min**	**Capacitate** (min)
A	2	5	1	30	1000
B	-	4	2	40	4720
C	1	-	-	50	400
D	1	-	2	20	1000

Modelare AG

- **Indivizi** = numarul de unitati din fiecare operatie atribuit fiecarei resurse.

$Nr.O1_A$	$Nr.O2_A$	$Nr.O3_A$	$Nr.O1_{\mathbf{B}}$	$Nr.O2_B$	$Nr.O3_B$	$Nr.O1_C$	…..

- **Functia de evaluare**: functie de cost = costul total al utilizarii resurselor + puncte totale de penalizare pentru depasirea capacitatii resurselor.

$$\mathbf{Fitness = Nr.O1_A*2*30 + Nr.O2_A*5*30 + .. +}$$
$$\mathbf{\alpha*(Nr.O1_A*2 + Nr.O2_A*5 + Nr.O3_A*1 - 1000 + \ldots)}$$

trebuie minimizat

- α - ponderea penalizarilor pt violarea restrictiilor
- Solutia se obtine in aprox 60 generatii cu 50 indivizi si o valoare a solutiei de 99% din solutia de cost optim.

Resursa	O1	O2	O3	Cost/min	Capacitate
A	2	5	1	30	1000
B	-	4	2	40	4720
C	1	-	-	50	400
D	1	-	2	20	1000

3. Co-evolutie cooperativa

- Modeleaza un sistem cu 2 sau mai multe sup-populatii (specii)
- Speciile sunt izolate genetic
- Speciile interactioneaza intre ele si au relatii de cooperare
- Speciile pot fi evoluate secvential sau paralel
- Pt a evalua o specie se formeaza colaborari cu indivizi (reprezentanti) din celelalte specii

3.1 Co-evolutie cooperativa - principii

- Potter, De Jong, 2000
- Alegere reprezentanti
  - cel mai bun (greedy)
  - aleator
- Evolutia genetica a mai multor specii in populatii separate este o solutie la problema mentinerii diversitatii intre componente
- Fiecare populatie incearca sa acopere o "nişă" a solutiei

SubPopulatie 1
Reprez P_1
SubPopulatie i
$Individ_1$ P_i
$Individ_j$ P_i
$Individ_k$ P_i
SubPopulatie N
Reprez P_N
Evaluare indivizi ai SubPopulatiei i

Co-evolutie cooperativa – maximizare functie

- Maximizarea unei functii f(x1,..,xn)
- n sub-populatii, pentru fiecare variabila
- evolueaza independent
- firness – cel mai bun individ din n-1 subpopulatii + individual current – maximizarea functiei

3.2 Problema: acoperirea sirurilor

- **M**= **Match set** = o multime de *N* vectori binari
- **T** = **Target set** = o multime de *K* vectori binari, K>>>N
- Fiind dat **T**, sa se gaseasca **M** care "acopera cel mai bine" **T**
- **Puterea de acoperire a unui vector cu P elemente**

$$S(x,y)=\sum_{i=1}^{P}\begin{cases}1 \text{ daca } x_i = y_i \\ 0 \text{ in caz contrar}\end{cases}$$

- **Puterea de acoperire a unei multimi M (match set)**

$$S(M)=\frac{1}{K}\sum_{i=1}^{K}\max(S(m_1,t_i),\ldots,S(m_N,t_i))$$

Problema: acoperirea sirurilor

- **N** Sub-Populatii – N sabloane de siruri
- Fitness individ = calculat ca valoarea Match set ***S(M)*** pentru un set de N vectori in care individul current din subpopulatia ***i*** si cel mai bun individ din restul de ***N-1*** sub-populatii

$$S(M) = \frac{1}{K}\sum_{i=1}^{K} \max(S(\vec{m}_1,\vec{t}_i),\ldots,S(\vec{m}_N,\vec{t}_i))$$

- Reprezentant subpopulatii – cel mai bun din fiecare (initial aleator)

- Dimensiune subpopulatii – 50 indivizi
- two point crossover
- bit flip mutation, prob = 1 /lung individ
- Selectie proportionala

Evaluarea abordarii

- Se definesc niste sabloane de siruri
  - parte fixa (0 sau 1)
  - parte variabila #
- 3 Target sets: T1, T2, T3, fiecare cu 200 siruri a cate 64 biti

T1

```
11111111111111111111111111111111################################
################################11111111111111111111111111111111
```

T2

```
1111111111111111#######################################################
################1111111111111111#######################################
#################################1111111111111111#######################
#######################################################1111111111111111
```

T3

```
1111111#################################################################
#######1111111#################################################################
################1111111#################################################################
##########################1111111#######################################################
#################################1111111#################################################
##########################################1111111#######################################
#######################################################1111111#########################
################################################################1111111
```

Evaluarea abordarii

Nr mediu de biti acoperiti

Evaluarea abordarii

T1

```
Species 1: 11111111111111111111111111111111101001100010001111111000101101 11
Species 2: 00100000010011101101000010001000111111111111111111111111111111 11
```

T2

```
Species 1: 1111111111111111000110011001010011111111111111111011111111110111
Species 2: 1111111111011111111111101011111111111111111111111000010100010000
Species 3: 0101010101101101111111011111110100001010001011101111111111111111
Species 4: 1001101110011000111111111111111110110100010100011010101101101111
```

T3

```
Species 1: 1100100011111110001011110100000011001011111111100110100111100 10
Species 2: 1011111001010001111111110010101110010000101101111110111011010010
Species 3: 1010111100000111111101111001000011100110011111011110111110000011 1
Species 4: 0000111011111111101110010111101011111111010001101100010111111101
Species 5: 1101100100100010110000111100101111111111001010110010001111111 11
Species 6: 0001011011111011011010001111111100110011111111101111111100110000
Species 7: 1111001011111110100000101011010100100100100100010111000111111111
Species 8: 1111111110001101111000001111111101011010110111101100001111101010
```

Evolutie catre un nivel adecvat de generalitate

- De cate specii este nevoie?
- Exemplu – acoperire optima

```
111111111111111111111111111111
111111111000000000000000000000
000000000000000000000001111111111
```

Match set (20+22+22)/3=21.33

```
111111111100000000000001111111111
```

1 Sablon

2 Sabloane

```
111111111111111111111111111111111
100101101100000000000001111110101
```

Match set
(32+20+24)/3=25.33

3 Sabloane

```
111111111111111111111111111111111
111111111000000000000000000000000
000000000000000000000001111111111
```

Evolutie catre un nivel adecvat de generalitate

- Target set – 30 siruri generate din 3 sabloane de 32 biti

```
11111111111111111111111111111111
11111111110000000000000000000000
00000000000000000000001111111111
```

```
1##1###1###11111##1##1111#1##1###1#1111##111111##1#11#1#11######
1##1###1###11111##1##1000#0##0###0#0000##000000##0#00#0#00######
0##0###0###00000##0##0000#0##0###0#0000##001111##1#11#1#11######
```

- Se variaza numarul de specii de la 1 la 4

Evolutie catre un nivel adecvat de generalitate

- Potter, De Jong, 2000

Evolutie catre un nivel adecvat de generalitate

- Potter, De Jong, 2000

Introducere treptata a unor noi subpopulatii

- Potter, De Jong, 2000

3.3 Problema "tragediei resurselor comune"

- Tragedy of commons
- Exploatare rationala a resurselor regenerabile de catre mai multi agenti
- Motivati individual DAR
- Trebuie sa ajunga la un anumit grad de cooperare

Descriere problema

- O instanta: pescuitul rational
- Companii de pescuit (C_i)
- Fiecare companie are mai multe vapoare de pescuit (NS_i)
- Se poate pescui in mai multe locatii - fishing banks (R_p)
- Se poate pescui in timpul a diferite sezoane (T_j)
- O locatie – resursa regenerabila

Modelare

Request
Company 3 Agent
Company 1 Agent
Accept
Self representation
World representation
Result
ModifyRequest
Request
Environment Agent
Companies
Fish banks
Environment state
Company 2 Agent

Modelare

Population of Company *1*
Best of C_1
Population of Company *i*
Individual$_1$ of C_i
Individual$_j$ of C_i
Individual$_n$ of C_i
Population of Company *M*
Best of C_M
Evaluate individuals of Company *i*

Company *i*

Season: T1, T2, T3, T4

Place at Ti: H, R1, R2, R3

First representation

$(NoB_{Place}, NoB_{Season}) * NoShips$

Company *i*

Place of Ship NS*i*: H, R1, R2, R3

Place of Ship 1: H, R1, R2, R3

Second representation

$(NoB_{Place}, NoShips) * NoSeasons$

Parametrii algoritmului genetic:

- Two-point crossover
- Probability of mutation in every individual: **0.1**
- Population size: **100**
- Length of an individual: **100**
- The selection is based on the stochastic universal sampling
- Number of generations: **20..200**

Parametrii algoritmului evolutiv:

- Crossover rate: **0**
- Probability of mutation in every individual: **0.05..0.50**
- Population size: **100**
- Length of an individual: **100**
- Number of generations:**150**

RUN 1					RUN 2				
Company 1	**H**	**R1**	**R2**	**R3**	**Company1**	**H**	**R1**	**R2**	**R3**
Season 1	3	1	5	1	Season 1	2	2	1	5
Season 2	2	3	3	2	Season 2	1	3	3	3
Season 3	1	3	2	4	Season 3	0	3	3	4
Season 4	2	0	3	5	Season 4	3	4	1	2
Season 5	0	3	3	4	Season 5	1	3	0	6
Fitness value	0.836166666666				Fitness value	0.856229166666			
Company 2	**H**	**R1**	**R2**	**R3**	**Company2**	**H**	**R1**	**R2**	**R3**
Season 1	2	4	2	2	Season 1	2	3	1	4
Season 2	1	4	2	3	Season 2	3	3	1	3
Season 3	1	1	2	6	Season 3	4	2	1	3
Season 4	3	2	2	3	Season 4	2	3	4	1
Season 5	0	2	3	5	Season 5	3	2	3	2
Fitness value	0.855166666666				Fitness value	0.730333333333			
Company 3	**H**	**R1**	**R2**	**R3**	**Company 3**	**H**	**R1**	**R2**	**R3**
Season 1	1	4	3	2	Season 1	2	4	1	3
Season 2	3	4	0	3	Season 2	3	2	2	3
Season 3	2	5	3	0	Season 3	1	2	3	4
Season 4	1	1	5	3	Season 4	2	0	5	3
Season 5	2	3	2	3	Season 5	1	0	5	4
Fitness value	0.817166666666				Fitness value	0.826041666666			

Rezultate pentru 3 companii si 2 rulari

4. Utilizarea GA pentru invatarea regulilor de decizie

- Reguli de forma:

  if A_1=v1
  and x1<A_2<=v2
  …
  then Class C_1

- valori de atribute discrete si continue
- Multime de invatare E={e_1,..e_M}
- e$\in$E este descris prin N atribute A_1, ..A_N si etichetat cu o clasa C(e) $\in$C
- Atribute cu valori discrete – multime finita V(A_i)
- Atribute cu valori continue – un interval V(A_i) = [l_i,u_i]

4.1 Reguli de decizie

- O clasa $c_k \in \mathcal{C}$
- Exemple pozitive - $E^+(c_k) = \{e \in E \mid C(e)=c_k\}$
- Exemple negative - $E^-(c_k) = E - E^+(c_k)$
- O regula de decizie R

  if t_1 **and** t_2 .. **and** t_r **then** c_k
- LHS
- RHS – apartenenta unui exemplu la o clasa
- Multime de reguli - RS : multimea de reguli care au aceeasi RHS
- $C_{RS} \in \mathcal{C}$ – indica clasa specificata de RHS a unei multimi RS
- GA este apelat pt fiecare $c_k \in \mathcal{C}$ ca sa gaseasca RS ce separa $E^+(c_k)$ de $E^-(c_k)$
- Functia de fitness -> prefera regulile cu mai putine conditii, care acopera cat mai multe ex+ si cat mai putine ex-

4.2 Reprezentare

- Un cromozon reprezinta un RS (reguli cu acelasi RHS)
- Numarul de reguli din RS nu este cunoscut ➔ Cromozomi de lungime variabila + operatori care sa schimbe numarul de reguli
- 1 cromozom = concatenare de siruri LHS
- Fiecare sir are o dimensiune = LHS a unei reguli de decizie (nu are nevoie de RHS)
- 1 sir este compus din N sub-siruri (LHS) – o conditie pt fiecare atribut

Reprezentare

- Atribute cu valori discrete - flag (0/1 pt fiecare valoare)
- Atribute cu valori continue – l_i, u_i, $l_i < A_i <= u_i$ ($+\infty$, $-\infty$)
- l_i, u_i sunt selectate dintr-o multime finita de valori prag de separare
- Valori prag de separare = punct de separare intre exemple succesive sortate in ordine crescatoare a valorilor A_i - mijlocul intervalului de separare ex+ cu ex-

- ex+ ex+ ex+ | ex- ex- ex- | ex+ ex+ | ex- ex- A_i ↗

  th_i^{k-1} th_i^{k} th_i^{k+1}
- Daca conditia nu este prezenta – $l_i = -\infty$, $u_i = +\infty$

Reprezentare

Exemplu

- 2 atr valori continue: Salary, Amount
- 1 atr valoare discreta – Purpose (car, house, school)
- Classa - Accept

Salary	Amount	Purpose	
$-\infty$ $+\infty$	$-\infty$ 250	1 1 1	if Amount<250 then ACCEPT
100 250	$-\infty$ 500	1 1 1	if 100<salary<250 and Amount <500 then ACCEPT
750 $+\infty$	$-\infty$ $+\infty$	1 1 0	if Salary>750 and Purpose = (car or house) then ACCEPT

4.3 Operatori genetici

4 operatori aplicati pe un unic set de reguli:

- Schimbarea unei conditii din LHS (a)
- Introducere exemplu pozitiv (b)
- Eliminare exemplu negativ (c)
- Eliminare regula (d)

2 operatori aplicati pe 2 seturi de reguli RS1 si RS2:

- Copiere regula (e)
- Crossover (f)

Operatori genetici

(a) Schimbarea conditiei

- Un operator de tip mutatie – modifica o singura conditie referitoare la un atribut A_i
- Daca A_i discret – selecteaza aleator un flag si inverseaza
- Daca A_i cont – inlocuieste aleator o valoare l_i sau u_i cu o valoare de prag de separare

(b) Introducere ex+

- Modifica o regula R din RS a.i. sa acopere un $e+\in E^+(C_{RS})$ neacoperit din R
- Toate conditiile din regula care sunt in conflict cu *e*+ trebuie sa fie schimbate.
- A_i discret – seteaza flag
- A_i cont – $l_i<A_i<=u_i$ cu $u_i<A_i(ex+)$ – cel mai mic u_i' a.i. $u_i'>=A_i$; similar daca $l_i>= A_i(ex+)$

Operatori genetici

(c) Eliminare ex-

- Modifica o unica regula *R* din setul *RS*.
- Selecteaza aleator un exemplu *e*- din multimea de exemple negative, acoperit de *R*.
- Apoi altereaza o conditie din *R* a.i. *R* sa nu mai acopere *e*-.
- Daca in conditie atr discret *Ai* atunci flag corespunzator *Ai*(*e*-) este pus pe 0.
- Daca *Ai* este atribut cu valori continue $li < Ai <= ui$ este micsorat fie la $li' < Ai <= ui$ fie la $li < Ai <= ui'$, unde li' este cea mai mica valoare de prag de separare *Ai*(*e*-) $>= li'$ si ui' este cea mai mare valoare de prag de separare a.i. $ui' < Ai$(*e*-).

Operatori genetici

Eliminare regula si copiere regula – singurii operatori care schimba numarul de reguli dintr-un set de reguli.

(d) Eliminare regula

- Elimina aleator o singura regula din *RS*.

(e) Copiere regula

- Adauga la *RS*1, o copie a unei reguli selectata aleator din *RS*2, cu conditia ca numarul de reguli din *RS*1 sa fie ma mic decat *maxR*.
- *maxR* este un parametru stabilit de proiectant, care limiteaza numarul maxim de reguli dintr-un set.

(f) Crossover

- Selecteaza aleator 2 reguli R_1 si R_2 din *RS*1 si *RS*2. Apoi aplica crossover intre sirurile ce reprezinta R_1 si R_2.

4.4 Fitness

- Atribuire bazata pe rang
- ***Scop = reducerea numarului de erori***
- E_{RS} – multimea de exemple acoperite de RS (clasificate in clasa C_{RS})
- pos= $|E^{+}_{RS}| = |E_{RS} \cap E^{+}(C_{RS})|$ – card multimea de ex+ clasificata corect de RS
- neg = $|E^{-}_{RS}| = |E_{RS} \cap E^{-}(C_{RS})|$ – card multimea de ex- acoperita de RS
- Numarul total de ex+ si ex-

  $POS = |E^{+}(C_{RS})|$

  $NEG = |E^{-}(C_{RS})|$
- RS clasifica corect daca **POS = pos** si **neg = 0**

$$|E^{+}(C_{RS})| = |E^{+}_{RS}| \quad \text{si} \quad |E^{-}_{RS}| = 0$$

Fitness

F_{error} = Pr(RS) / Compl(RS)

- **Pr(RS)** = probabilitatea de a clasifica corect un exemplu din setul de invatare de multimea de reguli RS
- **Compl(RS)** = complexitatea multimii RS
- **Pr(RS) = (pos + NEG – neg) / (POS+NEG)**
- **Compl(RS) = $(L/N+1)^{\alpha}$**

  L – numarul total de conditii din RS

  N – numarul de atribute

  α - stabilit de proiectant in [0.001..0. 1]
- Trebuie maximizata probabilitate si minimizata complexitatea pt a obtine un set compact de reguli si o clasificare corecta

5 Programare genetica

- Aplicarea algoritmilor genetici asupra unei populatii de programe
- Indivizii = nu sunt gene cu dim fixe ci programe – dimensiune variabila
- Necesita putere mare de calcul
- Sortare, cautare, strategii in jocuri,

Programare genetica

Reprezentarea indivizilor

- Arbori – programare functionala
- Programare genetica liniara – programe in limbaje clasice
- Discipulus – software comercial – utilizeaza cod masina (reprezentare binara)

.

Programare genetica

- Arbori – programare functionala
- Programele = arbori sintactici

$$\max(x * x, x + 3 * y)$$

- Noduri interne = functii
- Frunze = terminale
- Programe = compuse din functii
- Set de functii grupate intr-o radacina
- Arborii – notatie prefixata (S-expression)

$$(\max\ (*\ x\ x)\ (+\ x\ (*\ 3\ y)))$$

Pasi pregatitori

Stabilirea reprezentarii si a parametrilor de control

1. Set de terminale (vars, funct cu 0 args, const)
2. Set de functii (aritmetice, conditionale)
3. Fitness (explicit sau implicit)
4. Parametrii de control pentru AG
5. Conditia de terminare si metoda de alegere a rezultatului

Algoritmul genetic

1. Initializare: populatie generata aleator cu programe compuse din functii si terminale
2. Repeta pentru mai multe generatii

- Executa fiecare program si determina fitness
- Selectioneaza cf schemei de selectie
- Creaza noi indivizi prin aplicarea op gen:
  - Reproductie: copiaza individ
  - Crossover: creeaza 2 descendenti din 2 parinti sau 1 parinte
  - Mutatie: asupra unui individ existent in populatie

3. Testeaza conditie de terminare

Metoda de initializare

Populatie generata aleator cu programe compuse din functii si terminale

Construieste aleator arborele pana la o adancime maxima *max_d*

1. Metoda “Full” – arbore binar complet cu terminale numai pe ultimul nivel
2. Metoda “Grow” –arbore binar cu terminale pe orice nivel

Full si Grow

Operatori genetici

Crossover 2 parinti = parinti diferiti

Crossover 1 parinte = parinti identici (reproducere)

Crossover point = 90% nodui interne, 10% frunze

Mutatie = crossover intre un program existent si unul generat aleator

Toate programele obtinute sunt valide din punct de vedere sintactic

Crossover

Parinti → Descendenti

Crossover

Crossover cu parinti diferiti

Crossover cu parinti identici

Mutatie

Mutation
Point
+
+
*
x
y
3
Mutation
Point
+
+
*
x
y
y
/
x
2
Randomly Generated
Sub-tree
*
y
/
x
2

Evaluare

Fitness

- eroarea intre iesirea actuala si iesirea dorita
- cat de bine recunoaste anumite sabloane
- castig in jocuri, etc.

Executat pe seturi de valori – fitness cases

Exemplu

Program genetic pt a calcula volarea ecuatiei

$x^2 + x + 1$, cu x in [-1.0, 1.0]

T (terminal set)={x, R}, R = (-5, 5)

F (function set) = {+, -, *, /} , cu / modif pt 0

Fitness = integrala erorii intre functia rezultata si functia corecta

- **Selectie:** turneu, proportionala cu fitness
- **Crossover** – 90 % din populatie
- **Reproductie** - 8%
- **Mutatie** - 2%
- **Fitness** < 0.01
- Metoda de initializare Grow

Exemplu

(a) **x+1** (b) **x^2+1** (c) **2** (d) **x**

0.67 1.0 1.67 2.67

(a) **x+1,** 0.67 (b) **x²+1,** 1.0 (c) **2,** 1.67 (d) **x,** 2.67

Reprod ***Mutatie*** ***Crossover***

(c) **x,** 2.67

(a) **x+1,** 0.67 (b) **1,** 1.0 (d) **x²+x+1**, 0

6 AG pentru generare de imagini

- Programul *Gaia* – generarea de noi imagini
- Fiecare imagine este generata prin evaluarea unei formule matematice
- Sa se gaseasca formule care prin evaluare sa produca imagini interesante.
- GA pt a produce astfel de formule
- Se genereaza aleator o formula si se genereaza variatii ale acesteia
- Utilizatorul selecteaza cele mai interesante imagini
- Formulele selectate devin noi generatii; procesul se repeta
- Conceptul de evolutie este utilizat pentru a genera noi formule din cele existente

GA pentru generare de imagini

GA pentru generare de imagini

- (lerp #(0.524 0.389 -0.394) (- (triwave (RAD)) 0.590) (PHY))

- (color_grad "earth" (gradient (log (+ (&& (lerp (PHY) #(-0.080 0.408 0.254) (RAD)) (RAD)) #(-0.098 -0.277 -0.840)))))

- (color_noise (mod (warped_color_noise (X) -0.003 -0.296 #(-0.359 0.020 -0.790)) (Y)) (color_noise (X) (invert (Y))))

GA pentru generare de imagini

GA pentru generare de imagini

- (lerp (* (vector -0.422 (warped_bw_noise (RAD) #(-0.468 -0.375 -0.624) (Y) (RAD)) (RAD)) (X)) (RAD) (bw_noise (PHY) (log 0.529)))

- (triwave (- (^ (& (RAD) (PHY)) (PHY)) #(-0.176 0.738 -0.928)))

- (mynoise (triwave (|| (RAD) (PHY))) (RAD))

GA pentru generare de imagini

GA pentru generare de imagini

- (lerp (* (X) (X)) (/ (/ #(0.204 0.166 0.711) (RAD)) (RAD)) (bw_noise (RAD) (RAD)))

- (triwave (lerp (min (lerp (PHY) (lerp (PHY) 0.033 (RAD)) #(0.050 0.137 -0.586)) (PHY)) (IRAD) (RAD)))

- (color_noise (cos (+ (bw_noise (mod (X) (Y)) #(-0.419 -0.415 0.673)) (Y))) 0.296)

GA pentru tranzitii de imagini

- Programul poate genera de asemenea tranzitii intre imagini generate
- Utilizatorul selecteaza sursa si desinatia si programul gaseste secventa de imagini care face tranzitia
- Daca formulele nu au nimic in comun, tranzitiile sunt pure amestecuri ale imaginilor
- Daca formulele au similaritati se obtin tranzitii interesante

GA pentru tranzitii de imagini

Sursa: (triwave (abs (RAD))) **Dest:** (triwave (abs (X)))

GA pentru tranzitii de imagini

Sursa: (triwave (abs (X))) **Dest:** (triwave (&& (PHY) (PHY)))

GA pentru tranzitii de imagini

Sursa: (/ (& (Y) (X)) (RAD)) **Dest:** (/ (& (Y) (RAD)) (RAD))

Genotip

- Gaia codifica o imagine printr-o formula si un domeniu
- Ambele elemente sunt genotipul solutiei
- Formulele = set de operatori, variabile si constante
- Formula – S-expression
- Domeniul indica unde se evalueaza formula
- Domeniul este o regiune in planul real specificata de limite
- Domeniul implicit este [-1..1] x [-1..1].

Genotip

- Formulele pot fi oricat de lungi
- Operatorii cu argumente – noduri interne
- Operatorii fara argumente – frunze

S-Expression	**Domeniu**
(+ (+ (X) (Y)) (Y))	[0..1] x [0..1]
(gradient (invert (- (0.5) (RAD))))	[-1..1] x [-1..1]
(abs (lerp (noise (/ (triwave (mod (PHY) -0.190)) (RAD)) (min (RAD) -0.873)) (Y) (X)))	[-1..1] x [-1..1]

Formule si operatori

- 5 clase de operatori:

1. ***Operatori de domeniu*: X, Y, RAD, PHY** – depind de domeniul pe care se evalueaza formula.

X, Y

Intoarce o imagine care variaza luminozitatea pixelilor din domeniu fata de axa X sau Y.

Imagini rezultate in domeniul [0..1] x [0..1]

Formule si operatori

RAD

Luminozitatea fiecarui pixel a imaginii este proportionala cu distanta fiecarui pixel din domeniu fata de centru

IRAD

Similar cu RAD dar luminozitatea unui pixel depinde de distanta la cel mai apropiat intreg impar din domeniu

Imagine avand colturile (-1,-1) (-1,1) (1,1) (1,-1)

Formule si operatori

PHY

The luminance of the resulting image represents the angular coordinate of the pixel, with the zero heading down.There where the value is greater than 1 a white pixel is used.

Formule si operatori

2. Functii de 1 argument: **cos, sin**, **normalize, gradient, abs, round, triwave, ...**

TRIWAVE

Transforma orice imagine intr-o imagine cu pixeli in intervalul [0,1]

Formule si operatori

3. *Operatori de combinare simpla*: combina 2 imagini si intorc combinatia

Adunare, scadere, multiplicare sau operatii logice

4. Operatori de combinare complexa: au mai multe imagini ca argument; una din imagini determina parametrii combinarii

LERP, noise functions, color grad, ...

5. Operatori diversi: Imagini importate sau sabloane de imagini

Formule si operatori

LERP

Trei imagini A,B,C si calculeaza imaginea rezultata ca:

A+(B-A)*Triwave(C).

Realizeaza o interpolare liniara de la A la B folosind C ca pondere ainterpolarii

De obicei se include Triwave pentru a limita pe C in [0..1]

Mutatie

Evolutia se realizeaza prin 2 operatori:

- Mutatie
- Combinare

Mutatie

- Mutatia se aplica pe un singur nod ales aleator din arbore (eventual si pe noduri descendente ale acestuia).
- Imaginea rezultata area spect apropiat cu ce dinaintea mutatiei

Operatori de mutatie

- ***Nod nou:*** Nod selectat inlocuit cu nod generat aleator. Schimbari importante daca nod aproape de radacina
- ***Ajustare nod:*** Schimbare oprator din nod sau schimbare valoare constanta – schimbari miciu
- ***Nod ca argument*:** Un nod devine argumentul unui nod ales aleator, acesta din urma inlocuieste nodul selectat; se genereaza eventual noi operatori
- ***Argument ca nod*:** Un argument dintr-un nod inlocuieste nodul selectat
- ***Nod ca unchi:*** un nod este inlocuit cu unul superior in arbore
- ***Reordonare argumente:*** schimba ordinea argumentelor unui nod selectata (daca are 2 argumente si daca schimbarea este legala)

Exemple de mutatie

- Parinte:

(triwave (mod (triwave (PHY)) (RAD)))

- Domenie: [-1..1] x [-1..1]

Exemple de mutatie

(triwave (mod (triwave (PHY)) (RAD)))

(triwave (mod (lerp (PHY) (Y) (Y)) (RAD)))

Exemple de mutatie

1. (triwave (mod (lerp (PHY) (Y) (Y)) (RAD)))
2. (mod (triwave (PHY)) (RAD))
3. (triwave (mod (^ (triwave (PHY)) (X)) (RAD)))
4. (triwave (mod (PHY) (RAD)))
5. (triwave (lerp (mod (triwave (PHY)) (RAD)) (Y) (RAD)))
6. (triwave (mod (max (triwave (PHY)) (RAD)) (RAD)))
7. (triwave (sin (triwave (PHY))))
8. (triwave (mod (+ (triwave (PHY)) (RAD)) (RAD)))
9. (triwave (mod (triwave (PHY)) (warped_color_noise (RAD) #(0.653 0.865 -0.369) #(0.683 0.337 -0.625) (X))))
10. (mod (mod (triwave (PHY)) (RAD)) (PHY))
11. (triwave (mod (RAD) (triwave (PHY))))
12. (triwave (rotate (mod (triwave (PHY)) (RAD)) (RAD)))
13. (triwave (mod (gradient (triwave (PHY))) (RAD)))
14. (invert (triwave (mod (triwave (PHY)) (RAD))))
15. (triwave (* (mod (triwave (PHY)) (RAD)) (X)))
16. (triwave (mod (abs (PHY)) (RAD)))

Combinare

Parinte 1

Parinte 2

Copil 1

Copil 2

Exemplu de combinare

Parinte 1:

(lerp (* (vector -0.422 (warped_bw_noise (RAD) #(-0.468 -0.375 -0.624) (Y) (RAD)) (RAD)) (X)) (RAD) (bw_noise (PHY) (log 0.529)))

Domeniu: [-1..1] x [-1..1]

Parinte 2:

(lerp (triwave (PHY)) (* (lerp #(0.524 0.389 -0.394) (- (triwave (RAD)) 0.590) (PHY)) (triwave (mod (triwave (PHY)) (RAD)))) (RAD))

Domeniu: [-1..1] x [-1..1]

Exemplu de combinare - copii

Tranzitii intre imagini

- Utilizatorul selecteaza o imagine sursa si o imagine destinatie
- Sistemul Gaia realizeaza automat tranzitia intre imagini
- Daca **genotipuri** (relativ) **similare** – efecte imteresante
- Daca **genotipuri diferite** – simpla amestecare
- Genotipuri relativ similare daca nodurile superioare sunt la fel
- Genotipul nou generat este *parametrizat in functie de timp*
- Noul genotip are noduri comune intre sursa si destinatie si interpoleaza in timp noduriel care sunt diferite
- t=0 genotip = sursa
- t=1 genotip = destinatie
- Intre 0 si 1 genotipul – o combinatie intre sursa si destinatie

Tranzitii intre imagini

Genotip sursa

Genotip destinatie

Genotip nou

Tranzitii intre imagini

Sursa: (triwave (abs (X))) **Dest:** (triwave (&& (PHY) (PHY)))

Tranzitii intre imagini

Sursa:(triwave (abs (RAD))) **Dest:**(triwave (abs (X)))

Tranzitii intre imagini

Sursa: (lerp (/ (gradient (& (PHY) (RAD))) (RAD)) (Y) #(0.545 0.495 0.981))

Dest: (lerp (Y) #(0.545 0.495 0.981) (/ (gradient (& (PHY) (RAD))) (RAD)))

Invatare automata

Universitatea Politehnica Bucuresti

Anul universitar 2021-2022

Adina Magda Florea

Curs Nr. 11

1. **Predictie Bayesiana**
2. **Aspecte teoretice ale invatarii - Invatare PAC**

1. Predictie Bayesiana

- Utilizarea teoriei probabilitatilor in predictie
- Modelul de invatare: date si ipoteze de invatare
- In predictia Bayesiana: datele sunt instante ale unor variabile aleatoare iar ipotezele sunt modele ale comportarii domeniului

Regula lui Bayes

- Predictia Bayesiana calculeaza probabilitatea fiecarei ipoteze pe baza datelor obtinute si face predictii pe baza acestora
- Predictia se face utilizand **toate ipotezele**, nu numai pe cele mai bune ipoteze

Regula lui Bayes

$$\mathbf{P(b|a) = P(a|b)\ P(b) / P(a)}$$

Generalizare

$$\mathbf{P}(Y|X) = \mathbf{P}(X|Y)\ \mathbf{P}(Y) / \mathbf{P}(X)$$

cu normalizare

$$\mathbf{P}(Y|X) = \alpha\ \mathbf{P}(X|Y)\ \mathbf{P}(Y)$$

Predictie Bayesiana

Exemplu: Pungi cu bomboane

h1: 100% cirese

h2: 75% cirese25% lamaie

h3: 50% cirese50% lamaie

h4: 25% cirese75% lamaie

h5: 100% lamaie

H- multimea de ipoteze, cu valori h1 .. h5 (tipul pungii de bomboane)

Se culeg probe d_1, d_2, … - variabile aleatore cu valori posibile cirese sau lamaie

Problema: prezice tipul de aroma a urmatoarei bomboane

Predictie Bayesiana

Fie **D** datele cu valorile observate **d** (lamaie sau cirese)

- Probabilitatea fiecarei ipoteze, pe baza regulii lui Bayes, este:

$$P(h_i|\mathbf{d}) = \alpha\, P(\mathbf{d}|h_i)\, P(h_i) \qquad i=1,5 \qquad (1)$$

$P(h3|d_1=\text{lamaie})$

- Elemente cheie: ipotezele apriori (**prior**) $P(h_i)$ si probabilitatea (**likelihood**) unei probe pentru fiecare ipoteza $P(\mathbf{d}|h_i)$

$$P(\mathbf{d}|h_i) = \Pi_j\, P(d_j|h_i) \qquad (2)$$

- Predictia asupra unei ipoteze necunoscute X

i.i.d.

$$\mathbf{P}(X|\mathbf{d}) = \Sigma_i\, \mathbf{P}(X|d,h_i)\, P(h_i|\mathbf{d}) = \Sigma_i\, \mathbf{P}(X|h_i)\, P(h_i|\mathbf{d}) \qquad (3)$$

Probabilitatea apriori $P(h_i)$ este cunoscuta

$P(d_2=\text{lamaie}|d_1=\text{lamaie})$

h1	h2	h3	h4	h5
0.1	0.2	0.4	0.2	0.1

Predictie Bayesiana

Presupunem probabilitatea apriori pentru

h1	h2	h3	h4	h5
0.1	0.2	0.4	0.2	0.1

Evolutia valorilor probabilitatilor ipotezelor, care incepe cu valorile prior

(a)

$P(h_i|d_1,\ldots,d_{10})$ din ecuatia (1)

Presupun h5, extrag 10 b.

h1	h2	h3	h4	h5
0.1	0.2	0.4	0.2	0.1

$$P(h_i|\mathbf{d}) = \alpha\, P(\mathbf{d}|h_i)\, P(h_i) \quad (1)$$

h1: 100% cirese

h2: 75% cirese 25% lamaie

h3: 50% cirese 50% lamaie

h4: 25% cirese 75% lamaie

h5: 100% lamaie

Calculam $P(hi|d_1=lamaie)$

$P(lamaie) = 0.1*0 + 0.2*0.25 + 0.4*0.5 + 0.2*0.75 + 0.1*1 = 0.5$

$\alpha = 1/0.5 = 2$

$P(h1|lamaie) = \alpha\, P(lamaie|h1)P(h1) = 2*(0*0.1) = 0$

$P(h2|lamaie) = \alpha\, P(lamaie|h2)P(h2) = 2*(0.25*0.2) = 0.1$

$P(h3|lamaie) = \alpha\, P(lamaie|h3)P(h3) = 2*(0.5*0.4) = 0.4$

$P(h4|lamaie) = \alpha\, P(lamaie|h4)P(h4) = 2*(0.75*0.2) = 0.3$

$P(h5|lamaie) = \alpha\, P(lamaie|h5)P(h5) = 2*(1*0.1) = 0.2$

h1	h2	h3	h4	h5
0.1	0.2	0.4	0.2	0.1

$$P(hi|\mathbf{d}) = \alpha\, P(\mathbf{d}|hi)\, P(hi) \quad (1)$$

$$P(\mathbf{d}|h_i) = \Pi_j\, P(d_j|h_i) \quad (2)$$

h1: 100% cirese

h2: 75% cirese 25% lamaie

h3: 50% cirese 50% lamaie

h4: 25% cirese 75% lamaie

h5: 100% lamaie

Calculam $P(hi|d_1,d_2)$

P(lamaie,lamaie) = 0.1*0*0 + 0.2*0.25*0.25 + 0.4*0.5*0.5 + 0.2*0.75*0.75+ 0.1*1*1 = 0.325

α = 1/0.325 = 3.0769

P(h1|lamaie,lamaie) = α P(lamaie,lamaie|h1)P(h1) = 3* (0*0*0.1) =0

P(h2|lamaie,lamaie) = α P(lamaie,lamaie|h2)P(h2) = 3 * (0.25*0.25*0.2) = 0.0375

P(h3|lamaie,lamaie) = α P(lamaie,lamaie|h3)P(h3) = 3 * (0.5*0.5*0.4) = 0.3

P(h4|lamaie,lamaie) = α P(lamaie,lamaie|h4)P(h4) = 3 * (0.75*0.75*0.2) = 0.3375

P(h5|lamaie,lamaie) = α P(lamaie,lamaie|h5)P(h5) = 3 * (1*1*0.1) = 0.3

h1: 100% cirese

h2: 75% cirese 25% lamaie

h3: 50% cirese 50% lamaie

h4: 25% cirese 75% lamaie

h5: 100% lamaie

h1	h2	h3	h4	h5
0.1	0.2	0.4	0.2	0.1

$$\mathbf{P}(X|\mathbf{d}) = \Sigma_i\, \mathbf{P}(X|h_i)\, P(h_i|\mathbf{d}) \quad (3)$$

$$P(d_2=\text{lamaie}|d_1=\text{lamaie}) = P(d_2|h1)*P(h1|d_1) + P(d_2|h2)*P(h2|d_1)$$
$$+ P(d_2|h3)*P(h3|d_1) + P(d_2|h4)*P(h4|d_1) + P(d_2|h5)*P(h5|d_1) =$$
$$= 0*0.1+0.25*0.2+0.5*0.4+0.75*0.3+1*0.2 = 0.65$$

Predictie Bayesiana

Observatii

- Ipoteza adevarata va domina in final predictia
- Predictia Bayesiana este optima: fiind dat setul de ipoteze, orice alta predictie va fi corecta mai putin frecvent
- Probleme daca spatiul ipotezelor este mare
- **Aproximare - MAP**
  - Se fac predictii pe baza unei singure ipoteze, respectiv **ipoteza cela mai probabila,** respectiv

$$h_i \text{ care maximizeaza } P(h_i|\mathbf{d})$$

MAP Learning – maximum aposteriori – vezi IA

Predictiile facute cf ipotezei h_{MAP} sunt aproximativ Baysiene in masura in care $P(X|D) \approx P(X \mid h_{MAP})$

Observatii

- In exemplul dat h_{MAP}=h5 dupa extragerea a 3 bomboane lamaie la rand deci MAP prezice ca a 4-a bomboana este lamiae cu probabilitatea 1.0 – o predictie mai riscanta decat predictia Bayesiana de 0.8
- Pe masura ce se colecteaza mai multe date, MAP se apropie de predictia Bayesiana

Observatii

- Gasirea h_{MAP} este mai simpla d.p.v al calculului decat predictia Bayesiana
- Daca presupunem o distributie uniforma a probabilitatii apriori peste spatiul ipotezelor, atunci invatarea MAP revine la a alege h_i care maximizeaza $P(\mathbf{d}|h_i)$
- **Maximul Likelihood**

Maximul likelihood learning

- Invatarea paramterilor unui model probabilistic
- **Exemplu:** o punga de bomboane cu cirese si lamai in proportie necunoscuta
- Daca proportia de bomboane este apriori la fel (distributie uniforma a probabilitatii apriori) putem folosi ML
- 1 variabila aleatore, **Aroma**, cu valori *cirese*, *lamaie* si **probabilitate cirese θ**
- Extragem **N** bomboane, cu **c** cirese si **l**=N-c lamai

Conform $P(\mathbf{d}|h_i) = \Pi_j P(d_j|h_i)$ (2)

$$P(\mathbf{d}|h_\theta) = \Pi_{j=1,N} P(d_j|h_\theta) = \theta^c (1-\theta)^l$$

Maximul likelihood learning

$P(\mathbf{d}|h_\theta) = \Pi_{j=1,N} P(d_j|h_\theta) = \theta^c (1-\theta)^l$

Ipoteza Maximum Likelihood este data de valoarea lui θ care maximizeaza $P(\mathbf{d}|h_\theta)$

Log likelihood

$L(\mathbf{d}|h_\theta) = \log P(\mathbf{d}|h_\theta) = \Sigma_{j=1,N} \log P(d_j|h_\theta) = c \log \theta + l \log(1-\theta)$

Pt a aflax maxim θ derivam L in raport cu θ

$$\frac{dL(d|h_\theta)}{d\theta} = \frac{c}{\theta} - \frac{l}{1-\theta} = 0 \qquad \theta = \frac{c}{c+l} = \frac{c}{N}$$

Ipoteza h_{ML} spune ca proportia de cirese din punga este egala cu proportia din bomboanele extrase pana la un moment

Maximul likelihood learning

Metoda Maximum Likelihood parameter learning

- Expresie pentru likelihood a datelor ca o functie de parametrii
- Se calculeaza derivate log likelihood
- Gaseste parametrii care fac derivate zero, deci max loglikelihood, deci max likelihood

Probleme

Expresii complicate

Daca setul de date este mic si anumite evenimente nu au fost observate (de ex nici o bomboana cu cirese) ipoteza ML atribuie probabilutate 0 acestor evenimente

Alt exemplu

In punga avem bomboane cu staniol colorat rosu sau verde – ***Invelis (I)*** si avem si variabila ***Aroma (A)*** – *cirese sau lamaie*

Invelis pt fiecare bomboana este ales probabilistic in functie de o distributie de probabilitate conditionate de aroma bomboanei

$$P(A=\text{cireasa}) \ - \theta$$

$$P(I=\text{rosu}|A) \quad \text{pt } A=\text{cireasa } \theta_1 \text{ si } A=\text{lamiae } \theta_2$$

In acest caz exista 3 parametrii θ θ_1 θ_2

P(A=cir)
θ

A	P(I|A)
cireasa	θ_1
lamaie	θ_2

Retea Bayesiana

Maximum Likelihood Learning

Likelihood ca o bomboana cu cirese sa fie ambalata in verde este

$P(A=\text{cirese}, I=\text{verde} \mid h_{\theta,\theta 1,\theta 2}) =$

$P(A=\text{cirese} \mid h_{\theta,\theta 1,\theta 2})\, P(I=\text{verde} \mid A=\text{cirese}, h_{\theta,\theta 1,\theta 2}) = \theta\,(1-\theta_1)$

- Extragem N bomboane din care **c** sunt cirese si **l** lamai
- $\mathbf{r_c}$ cirese au invelis rosu, $\mathbf{g_c}$ cirese au invelis verde, $\mathbf{r_l}$ lamai au invelis rosu, $\mathbf{g_l}$ lamai au invelis verde
- Likelihood este data de

$$P\left(d \middle| h_{\theta,\theta 1,\theta 2}\right) = \theta^c (1-\theta)^l \theta_1^{r_c} (1-\theta_1)^{g_c} \theta_2^{r_l} (1-\theta_2)^{g_l}$$

- Log likelihood

$$L=[c \log \theta + l \log(1-\theta)] + [r_c \log \theta_1 + g_c \log(1-\theta_1)] + [r_l \log \theta_2 + g_l \log(1-\theta_2)]$$

Cei trei parametrii θ θ_1 θ_2 apar fiecare intr-o singura suma deci pot fi optimizati separat

Maximum Likelihood Learning

$$\frac{\partial L}{\partial \theta} = \frac{c}{\theta} - \frac{l}{1-\theta} = 0$$

$$\theta = \frac{c}{c+l}$$

$$\frac{\partial L}{\partial \theta_1} = \frac{r_c}{\theta_1} - \frac{g_c}{1-\theta_1} = 0$$

$$\theta_1 = \frac{r_c}{r_c+g_c}$$

$$\frac{\partial L}{\partial \theta_2} = \frac{r_l}{\theta_2} - \frac{g_l}{1-\theta_2} = 0$$

$$\theta_2 = \frac{r_l}{r_l+g_l}$$

Solutia pentru θ este aceeasi ca anterior, solutia pentru θ_1, probabilitatea ca o bomboana cu aroma de cirese sa aiba un invelis rosu este proportia de bomboane cirese cu invelis rosu observate

Maximum Likelihood in RB

- Cu date complete, invatarea parametrilor cu maximum likelihood pentru o retea bayesiana poate fi realizata prin descompunerea in sub-probleme, cate una pentru fiecare parametru
- De exemplu
- $\mathbf{p(x_1,\ldots, x_4) = p(x_1)p(x_2|x_1)p(x_3|x_1)p(x_4|x_2, x_3)}$

$$P(\mathbf{d}|h_\theta) = \Pi_{j=1,N}\, P(d_j|h_\theta) = \Pi_{j=1,N} p(x_1)p(x_2|x_1)p(x_3|x_1)p(x_4|x_2, x_3)$$

Observatii

- Valorile parametrului pentru o variabila, fiind dati parintii ei, sunt reprezentate de valorile frecventei de aparitie a valorilor variabilei pentru fiecare valoare a variabilelor parinti
- Maximum likelihood Naive Bayes hypothesis
- Model de retea Bayesiana naiva – presupune independenta conditionala

Daca $x_1,..,x_n$ sunt independente conditional fiind dat y atunci
$P(x_1,..x_n \mid y) = \Pi_i P(x_i \mid y)$

Observatii

- Modelul prezentat anterior este naiv
- Presupunand variabile booleene, parametrii sunt

$\theta = P(C=true)$, $\theta_1 = P(X_i=true|C=true)$, $\theta_2 = P(X_i=true|C=false)$

Observand valorile atributelor x_1, x_2, ... probabilitatea fiecarei clase este

$$\mathbf{P}(C_k \mid x_1, x_2, \ldots) = \alpha\, \mathbf{P}(C_k) * \Pi_i\, \mathbf{P}(x_i|C_k)$$

si clasificarea $C_MAP = \text{argmax}_k\, \mathbf{P}(C_k) * \Pi_i\, \mathbf{P}(x_i|C_k)$

P(A=cir)
θ

A	P(I|A)
cireasa	θ_1
lamaie	θ_2

2. Aspecte teoretice ale invatarii

- Cand putem considera ca un algoritm de invatare a produs o ipoteza care poate prezice valori corecte pentru intrari necunoscute?
- Cum putem afla daca o ipoteza ***h*** este apropiata de ***f*** daca nu il cunoastem pe ***f***?
- De cate exemple avem nevoie pentru a produce un ***h*** bun?

Computational learning theory

Premisa

- Orice ipoteza care este semnificativ gresita *va fi gasita cu o probabilitate mare* dupa un numar mic de exemple, deoarece va face clasificari incorecte
- Astfel, orice ipoteza care este *consistenta cu un numar suficient de mare de exemple* de invatare este putin plauzibil sa fie grav gresita, adica trebuie sa fie **probabil aproximativ corecta** (PAC)
- **PAC = Probably Aproximately Correct**

Invatare PAC

- Orice algoritm de invatare care produce ipoteze care sunt PAC se numeste **algoritm de invatare PAC**

- Premisa invatarii PAC **este corecta** daca elementele din setul de invatare S si setul de test sunt **i.i.d.**

- Eroarea unei ipoteze ***h*** fata de ***f***, fiind data distributia D peste exemple, este:

$$\text{eroare}(h) = P(\ h(x) \neq f(x) \mid x \text{ din } D)$$

Probably Approximately Correct

- O ipoteza ***h*** este **aproximativ corecta** daca

  $$\text{eroare}(h) \leq \varepsilon$$

- Exista posibilitatea sa nu putem fixa o astfel de limita (S nereprezentativa)
- Dorim sa controlam probabilitatea ca ***h*** sa fie aproximativ corecta
- O ipoteza ***h*** este **probabil aproximativ corecta** daca

  $$P[\ \text{eroare}(h) \leq \varepsilon\ ] \geq 1-\delta$$

  $$(P[\ \text{eroare}(h) \geq \varepsilon\ ] \leq \delta)$$

Teorema PAC

- Daca exista un algoritm A care gaseste o ipoteza ***h*** $\in$ H consistenta cu N exemple de invatare, unde

$$N \geq \frac{1}{\varepsilon}(\ln(|H|) + \ln(\frac{1}{\delta}))$$

atunci **problema este "invatare PAC"** si

P[eroare(h) ≥ ε] ≤ δ

eroare(h) ≥ ε - h este "ε - *gresita*"

Demonstratie

- Dorim o limita pentru probabilitatea unei ipoteze care este consistenta si ε - *gresita* (eroare(h) $\geq \varepsilon$)
- Calculam probabilitatea ca o ipoteza grav gresita $h_B \in H_B$ sa fie consistenta cu N exemple
- Fie h_A consistenta cu N exemple de invatare

$P(h_A \text{ consistenta} \wedge h_A\ \varepsilon\text{ - } gresita) \leq$

$P(\exists h \in H\text{: h cons} \wedge \varepsilon\text{ - } gresita) =$

$P(\exists h \in H_B\text{: h cons})$

(in H_B eroare(h) $\geq \varepsilon$)

$P(\exists h \in H_B\text{: h cons}) \leq \Sigma_{h \in HB} P(\text{h cons})$

Demonstratie - cont

$$P(h \text{ cons}) = [P(h(x_1)=f(x_1)] \wedge \ldots [P(h(x_N))=f(x_N)] =$$

$$\Pi_{i=1,N} P(h(x_i)=f(x_i))$$

- **eroare(h_B)> ε** deci probabilitatea ca sa clasifice corect un exemplu (sa fie consistenta) este <1- ε
- Deci pentru N exemple, probabilitatea ca $\boldsymbol{h_B}$ sa fie consistenta este < $(1- \varepsilon)^N$

$$P(\exists h \in H_B: h \text{ cons}) \leq \Sigma_{h \in HB} P(h \text{ cons}) \leq |H_B| (1- \varepsilon)^N$$

$$\leq |H| (1- \varepsilon)^N$$

Demonstratie - cont

- Tinem cont de faptul ca $(1-x) \leq e^{-x}$

$$P(\exists h \in H_B: h \text{ cons}) \leq |H| (1-\varepsilon)^N \leq |H| e^{-\varepsilon N} \leq \delta$$

$$\boxed{N \geq \frac{1}{\varepsilon}(\ln(|H|) + \ln(\frac{1}{\delta}))}$$

$$N \geq \frac{0.69}{\varepsilon}(\log_2(|H|) + \log_2(\frac{1}{\delta}))$$

- Daca un algoritm de invatare produce o ipoteza care este consistenta cu multe exemple (N dat de formula de mai sus) atunci cu probabilitatea $1-\delta$ are eroarea cel mult ε

- N - Complexitatea de esantionare a spatiului de cautare

Exemplu

- Daca H este o multime de functii logice de ***n*** atribute – cate functii posibile de invatat?
- Daca avem $\boldsymbol{2^n}$ elemente necesare pt a defini o functie, atunci

$$|H| = 2^{2^n}$$

- De ex cu 6 atribute |H| = nr cu 20 digiti
- Complexitatea de esantionare a spatiului creste proportional cu $\boldsymbol{2^n}$

Complexitatea de esantionare

$$|H| = 2^{2^n}$$

$$N \geq \frac{0.69}{\varepsilon}(2^n + \log_2(\frac{1}{\delta}))$$

Complexitatea de esantionare pt AD

Arbore de decizie, ***m*** atribute

H_k – numarul de AD cu adancimea k

$H_0=2$

H_{k+1} = (#arb atr rad) * (#arb stg posibili) * (#arb drept pos)=

$m*H_k*H_k$

Fie $L_k=\log_2 H_k$

$L_0=1$, $L_{k+1}=\log_2 m+2L_k$

rezulta $L_k=(2^k-1)(1+\log_2 m)+1$

$$N \geq \frac{0.69}{\varepsilon}((2^k-1)(1+\log_2 m)+1+\log_2(\frac{1}{\delta}))$$