

Report άσκηση 4

Ανάλυση επιλογών για το Νευρωνικό Δίκτυο τύπου RBF (Περιγραφή Υλοποίησης):

Όσο αφορά το κτίσιμο/υλοποίηση του Νευρωνικού Δικτύου τύπου RBF, έχουμε 1 input layer, 1 hidden layer και 1 output layer. Το δίκτυο αυτό είναι πλήρως συνδεδεμένο (fully connected) καθώς κάθε νευρώνας ενός επιπέδου είναι συνδεδεμένος με κάθε νευρώνα του επόμενου επιπέδου. Ο κάθε νευρώνας του input layer ενώνεται με όλους τους νευρώνες στο hidden layer χωρίς όμως κάποιο weight, όμως ο κάθε νευρώνας που βρίσκεται στο hidden layer ενώνεται με τον μοναδικό νευρώνα που βρίσκεται στο output layer έχοντας ένα coefficient. Έχουμε 53 νευρώνες στο input layer στους οποίους βάζουμε τις εισόδους μας. Η κάθε είσοδος αντιστοιχεί σε ένα από τα 53 μοριακά χαρακτηριστικά του pattern/μορίου που ελέγχουμε. Όσο αφορά το hidden layer, ο αριθμός των νευρώνων που θα το απαρτίζουν καθορίζονται από τον χρήστη. Χαρακτηριστικό τους είναι ότι ο κάθε νευρώνας στο hidden layer έχει την δική του gaussian function και δικό του κέντρο (αντικατοπτρίζει την κατανομή των δεδομένων στο χώρο αλλά στην εφαρμογή μας επιλέγεται τυχαία από το training set). Το τι γίνεται ακριβώς σε έναν νευρώνα του hidden layer είναι η εύρεση της ευκλείδειας απόστασης μεταξύ του κέντρου του νευρώνα και του input vector και η αποτίμηση αυτής της τιμής στην gaussian function. Όσο αφορά το output layer, αποτελείται από μόνο 1 νευρώνα ο οποίος έχει σαν έξοδο το άθροισμα των γινομένων κάθε εξόδου ενός νευρώνα στο hidden layer με το coefficient του. Στόχος είναι να προβλέψουμε την βιολογική δράση του pattern/μορίου (δηλαδή είναι πρόβλημα παλινδρόμησης). Όσο αφορά τις παραμέτρους του Νευρωνικού Δικτύου τύπου RBF, έδωσα ποικίλες τιμές σχετικά με τα iterations, πλάτος gaussian function, learning rates και αριθμός των νευρώνων στο hidden layer. Ακόμα, να προσθέσω ότι η επιλογή των κέντρων, όπως ανέφερα πιο πάνω, είναι τυχαία άρα τρέχοντας το πρόγραμμα πολλές φορές με τα ίδια δεδομένα βλέπουμε διαφορετικές τιμές στο error και τα τελικά weights. Επίσης, σχετικά με τα βάρη και το bias κάθε νευρώνα αρχικοποιούνται μόνο μια φορά (στην αρχή του προγράμματος) και μετά αλλάζουν από την διαδικασία του προγράμματος. Τα βάρη αρχικοποιούνται σε μικρές τυχαίες τιμές από -1 μέχρι 1.

Μεταβλητές και αποτελέσματα εκπαιδεύσεων όπως βγήκαν από το πρόγραμμα:

A) Εκτέλεση προγράμματος με τυχαίες παραμέτρους(results.txt – weights.txt – centerVectors.txt)

Παράμετροι που δόθηκαν στο αρχείο παραμέτρων:

numHiddenLayerNeurons 20

numInputNeurons 53

numOutputNeurons 1

learningRates 0.5 0.55 0.5

sigmas 0.2

maxIterations 300

results - Notepad

File	Edit	Format	View	Help
1	2.348900665351169	0.26135485741041903		
2	1.3818790053309105	0.19252352029090447		
3	0.7964036510782644	0.17472002705210346		
4	0.5523937198845192	0.1680407304712571		
5	0.42672260493395603	0.165379954058596		
6	0.3501484003303115	0.16437475985145011		
7	0.2975334802935442	0.16382495602695074		
8	0.25884818972434454	0.1629912607157965		
9	0.22941954220584643	0.1614169056534859		
10	0.20658075549699348	0.15886904062524915		
11	0.18854267939741876	0.15529879016345385		
12	0.17400487729394015	0.15079525917498107		
13	0.1620008286748111	0.14553383708890286		
14	0.15181577310065103	0.13972652942653604		
15	0.14292923584624384	0.13358217424353017		
16	0.13496942482094165	0.12728106630391534		
17	0.12767651719403825	0.12096401928186994		
18	0.12087381754872727	0.11473238720373725		
19	0.11444565364278973	0.10865426983077424		
20	0.10832060834811913	0.10277281575328225		
21	0.10245874393882838	0.09711410670785073		
22	0.09684177522164186	0.09169354827433727		
23	0.09146548903477085	0.08652057618764684		
24	0.08633396159258598	0.08160186018470113		
25	0.08145526626011522	0.07694326826214393		
26	0.0768384242080898	0.07255083152417915		
27	0.0724913713582622	0.06843092096766115		
28	0.06841972698858703	0.06458983940880822		
29	0.0646261662835914	0.06103303653278538		
30	0.06111022388427505	0.05776415633449542		
31	0.0578683856899038	0.05478411175997526		
32	0.05489435789066248	0.05209034702277439		
33	0.052179431997935365	0.04967639724423244		
34	0.04971289014309215	0.04753179603836265		
35	0.04748241499895743	0.0456423244287472		
36	0.04547448323253073	0.043990547866993204		
37	0.0436747310571485	0.0425565577761499		
38	0.04206828627285729	0.04131882167100187		
39	0.040640064343051605	0.04025504962144112		
40	0.039375027619746455	0.03934300030599487		
41	0.0382584076146808	0.03856117186222781		
42	0.03727589074029655	0.037889346222608346		
43	0.036413768472866176	0.037308976854628965		
44	0.03565905349006968	0.03680342654177156		

results - Notepad

File	Edit	Format	View	Help
258	0.01737725130824149	0.015157145645471333		
259	0.0173518856658225	0.015141073601798317		
260	0.017326756585138468	0.01512531415502201		
261	0.017301864463981124	0.015109867801719861		
262	0.01727720977054969	0.015094735111403286		
263	0.01725279304430436	0.015079916728262406		
264	0.01722861489687859	0.015065413373006546		
265	0.017204676013057408	0.015051225844802472		
266	0.017180977151823634	0.015037355023313432		
267	0.017157519147474584	0.015023801870841198		
268	0.017134302910814494	0.015010567434573121		
269	0.01711132943042297	0.014997652848935276		
270	0.017088599774005286	0.014985059338055618		
271	0.017066115089825154	0.014972788218335436		
272	0.017043876608224644	0.014960840901135978		
273	0.017021885643233283	0.01494921889557605		
274	0.01700014359426944	0.014937923811448543		
275	0.016978651947938263	0.014926957362253593		
276	0.016957412279927284	0.01491632136835322		
277	0.01693642625700475	0.014906017760249045		
278	0.016915695639123946	0.014896048581986548		
279	0.01689522281636143	0.014886415994688543		
280	0.016875008137616578	0.014877122280222541		
281	0.016855055260307738	0.014868169845003991		
282	0.01683536580568393	0.014859561223942025		
283	0.01681594203514108	0.014851299084531009		
284	0.016796786318317544	0.014843386231093741		
285	0.016777901136050183	0.01483582560918235		
286	0.01675928908347122	0.01482862031014197		
287	0.016740952873251936	0.014821773575846357		
288	0.016722895338998983	0.014815288803609815		
289	0.01670511943881008	0.014809169551286151		
290	0.016687628258995058	0.014803419542561936		
291	0.01667042501797124	0.014798042672452862		
292	0.016653513070339222	0.01479304301301557		
293	0.016636895911148617	0.014788424819281797		
294	0.016620577180362434	0.014784192535430436		
295	0.016604560667528814	0.014780350801206361		
296	0.01658885031667017	0.014776904458601539		
297	0.016573450231402175	0.014773858558810204		
298	0.016558364680291572	0.01477121836947539		
299	0.016543598102466014	0.014768989382239936		
300	0.016529155113489218	0.014767177320621504		

weights - Notepad

File Edit Format View Help

weights :

From center 0 to the output, the value of the coefficient is 0.93154853902048002

From center 1 to the output, the value of the coefficient is -0.15334134077363912

From center 2 to the output, the value of the coefficient is -0.2622123530926096

From center 3 to the output, the value of the coefficient is -0.2226865425766744

From center 4 to the output, the value of the coefficient is 0.6210616538157162

From center 5 to the output, the value of the coefficient is 0.10022390266646297

From center 6 to the output, the value of the coefficient is -0.4212231620619312

From center 7 to the output, the value of the coefficient is 0.4859018630759485

From center 8 to the output, the value of the coefficient is -1.0200896681074958

From center 9 to the output, the value of the coefficient is 1.5090688210233587

From center 10 to the output, the value of the coefficient is 1.9305188786998049

From center 11 to the output, the value of the coefficient is 0.2924173829101619

From center 12 to the output, the value of the coefficient is -0.3293902780808632

From center 13 to the output, the value of the coefficient is 0.8002719510157111

From center 14 to the output, the value of the coefficient is 0.46807229682817425

From center 15 to the output, the value of the coefficient is -2.5588087658755542

From center 16 to the output, the value of the coefficient is 1.7425128988650884

From center 17 to the output, the value of the coefficient is -0.025201576007109344

From center 18 to the output, the value of the coefficient is 0.5478270280395682

From center 19 to the output, the value of the coefficient is 0.05905732158530972

centerVectors - Notepad

File Edit Format View Help

There are 20 centers. The centers were chosen randomly from the training file. The centers are the following :

19

4

2

7

17

8

9

15

3

10

20

14

0

16

11

1

18

12

5

13

Β) Εκτελέσεις προγραμμάτων με διαφορετικές παραμέτρους

n1=0.6,n2=0.65,n3=0.5,s=0.8,hidden neurons=10	n1=0.6,n2=0.65,n3=0.5,s=0.8,hidden neurons=20	n1=0.8,n2=0.7,n3=0.75,s=0.3,hidden neurons=20	n1=0.3,n2=0.2,n3=0.1,s=0.3,hidden neurons=15
Error (total iterations = 300)	Error (total iterations = 300)	Error (total iterations = 300)	Error (total iterations = 300)
1 1.886585322723163 0.3650268241564782	1 2.6070517772626816 0.20698396325301108	1 2.1714612823029125 0.1864615974817841	1 1.199021733705801 0.5600522418659197
2 1.349466195515611 0.33025835716106156	2 1.096115319191571 0.217084806538728	2 1.194997970130907 0.15750860799381897	2 1.6286000154890308 0.43658420923024804
3 1.0284870022369679 0.3188679383768257	3 0.7127282210223889 0.22412797220668534	3 0.8072742550474735 0.15133435573836598	3 1.2788356477691263 0.3843534653970864
4 0.8808168166541758 0.31005425360890204	4 0.5342975983543151 0.22375735811382924	4 0.6343910419092039 0.14941354799074105	4 1.0645889590758666 0.3492073482559769
5 0.7935502086224872 0.30150738167290175	5 0.42915857500455457 0.22491194727420818	5 0.5325430802815785 0.14897496614890934	5 0.91472381481077 0.3241172977004282
6 0.7329626772281679 0.2924596859299699	6 0.3488056744236364 0.21563540028864187	6 0.4580711984262379 0.1453772379315952	6 0.8017570322527415 0.3054162552100335
7 0.686841736526804 0.28298891172295465	7 0.2934001451371547 0.20494180923545033	7 0.406642567931332 0.1413035336168893	7 0.7125650744270589 0.29085288187960595
8 0.6489419692158405 0.2731825766830629	8 0.24952772845779 0.19367265521637964	8 0.3685564278006553 0.13717652646695566	8 0.6400119195889197 0.27901221664111087
9 0.6166590399674945 0.2632088372326778	9 0.21481664762053254 0.182356304872788	9 0.3393878772058235 0.13334873738469588	9 0.5797636558363325 0.26899335335695035
10 0.5885015254352182 0.2532362614535193	10 0.18766817061728588 0.17151653827177848	10 0.31604438491318115 0.129986682680424	10 0.5289606403597993 0.2602160973650564
11 0.5636405544771107 0.2434274611620903	11 0.16643550693279904 0.1618155056376187	11 0.2964496447200081 0.12711711665775022	11 0.4855983903627503 0.2523032701911707
12 0.5415433441140435 0.23393066914155805	12 0.14720805954026162 0.15272207354375905	12 0.27921770848380306 0.12468846926120322	12 0.44820919583764873 0.24500794774893236
13 0.5218379658081517 0.2248735345274324	13 0.12905724172281335 0.14391791359334483	13 0.2634259134271699 0.12262866283003843	13 0.41568392860264997 0.23816773670853597
14 0.5042401060406385 0.21635790783577613	14 0.11304660638875871 0.135608674378908	14 0.24846565400518755 0.12087937873112056	14 0.3871648323084945 0.2316756096251697
15 0.48851455600883514 0.20845645377579633	15 0.09882542813468954 0.12773263547023772	15 0.23392495849699443 0.11940366037704123	15 0.361977003363327 0.225461065794394
16 0.47445452849795616 0.2012115901461467	16 0.08633066657179915 0.12025389762152497	16 0.21947619094062806 0.11817060947570819	16 0.33958238405882796 0.21947783512369537
17 0.46187112703173777 0.1946368764663175	17 0.07556237391518487 0.11314022268351959	17 0.20480233906468054 0.11712512454662366	17 0.3195476098518167 0.21369578257613664
18 0.4505888478639025 0.18872053835228825	18 0.06654050995325395 0.10638557705403873	18 0.18969074742185857 0.11617027556295342	18 0.30152079405858484 0.2080955366448361
19 0.44044455621601025 0.1834304807513764	19 0.05922706840370603 0.10001328950523296	19 0.17428221926906187 0.11519029458039601	19 0.28521431017801724 0.20266489777158422
20 0.43128816900181066 0.17871999177794928	20 0.05345910702701476 0.09405432459891972	20 0.15907955351013922 0.11407848369431595	20 0.27039173612486217 0.19739641668623065
21 0.4229838238206659 0.1745333764114673	21 0.04896138315564543 0.08852129053023605	21 0.14462937388912578 0.11273821387251806	21 0.256857771714120045 0.19228574573562301
22 0.41541077826404105 0.17081093674705966	22 0.04542676590715281 0.0834023075590585	22 0.13130920007648245 0.11108239973763259	22 0.24445033580892017 0.18733050393088324
23 0.4084636754867346 0.16749295620231242	23 0.04258668154737941 0.07867124926927035	23 0.11931467668417745 0.10904201278295267	23 0.23303429776707005 0.18252948615587983
24 0.4020521057471268 0.1645225769825254	24 0.04023613963098307 0.07429919771824037	24 0.10869924560075718 0.10657533882995751	24 0.22249646056315142 0.17788210573722274

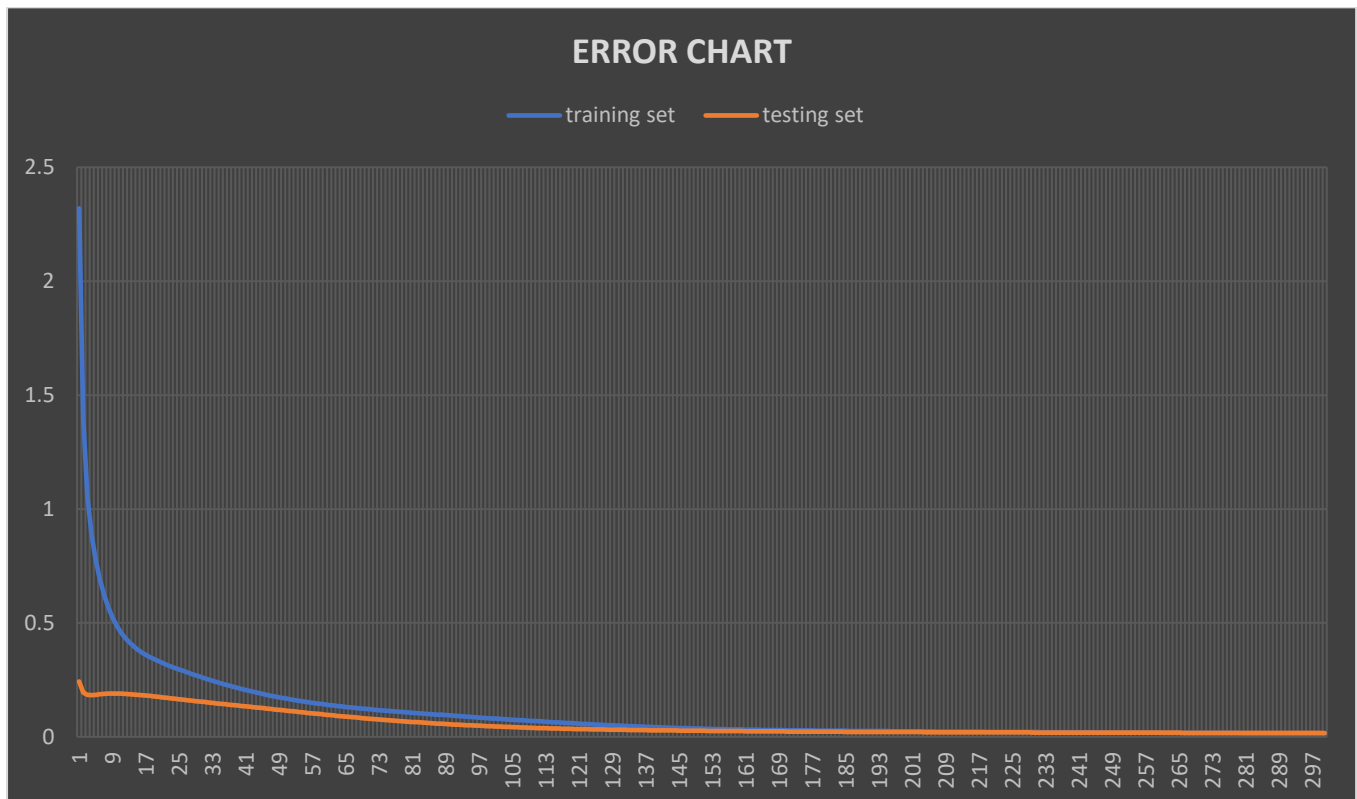
Ανάλυση αποτελεσμάτων:

Μέσα με τις διάφορες εκτελέσεις του προγράμματος άλλαξα συνεχώς το αρχείο με τις παραμέτρους που δεχόταν το πρόγραμμα μου. Αποτέλεσμα αυτού ήταν να οδηγηθώ σε αρκετά συμπεράσματα - παρατηρήσεις. Γενικές παρατηρήσεις ήταν οι εξής:

- Τα iterations βοηθούν το πρόγραμμα να φτάσει σε όσο το δυνατό χαμηλότερο error τόσο στο training όσο και στο testing. Δηλαδή όσο πιο πολλά iterations έδινα στο πρόγραμμα τόσο πιο μεγάλη ήταν η πιθανότητα το error του προγράμματός μου να συγκλίνει στο 0 και αυτό είναι λογικό αφού μέσα από τα iterations βελτιώνεται.
- Όσο πιο μεγάλο αριθμό νευρώνων στο hidden layer έχουμε (και κατ' επέκταση κέντρα) τόσο πιο μικρό error έχουμε. Ενώ το error μειώνεται και συγκλίνει προς το 0, ποτέ δεν θα φτάσει στην τιμή 0.
- Όσο πιο μεγάλο learning rate έχουμε τόσο πιο μικρό error έχουμε. Ενώ το error μειώνεται και συγκλίνει προς το 0, ποτέ δεν θα φτάσει στην τιμή 0.
- Ο συνδυασμός 2 παραμέτρων είναι επίσης καθοριστικός και αυτές οι παράμετροι είναι ο αριθμός των κέντρων και το πλάτος της gaussian function. Παρατήρησα ότι αν έχουμε μικρό αριθμό κέντρων και μεγάλο αριθμό πλάτους της gaussian function τότε πετυχαίνουμε κατά προσέγγιση (approximation), ενώ αν έχουμε μεγάλο αριθμό κέντρων και μικρό αριθμό πλάτους της gaussian function τότε πετυχαίνουμε παρεμβολή (interpolation). Αυτό είναι λογικό, αφού τα κέντρα αντιπροσωπεύουν την κατανομή των δεδομένων στο χώρο ενώ το πλάτος της gaussian function έχει να κάνει με το πόσο στενές είναι γκαουσιανές συναρτήσεις.
- Το normalization βοηθά στο να έχουμε καλύτερα και πιο ακριβή αποτελέσματα. Χωρίς το normalization, τα αποτελέσματα μας είναι τελείως λανθασμένα.
- Αφού χρησιμοποιούμε εκμάθηση RBF με μεταβλητά κέντρα πρέπει να κάνουμε update 3 παραμέτρους: βάρη, θέσεις κέντρων και πλάτος γκαουσιανής. Εάν κάνουμε update μόνο 1 ή 2 παραμέτρους τότε το error δεν θα είναι αντιπροσωπευτικό.

Γραφική του error:

A) results.txt



Μέσα από τις 2 γραφικές βλέπουμε ότι πάντα το error στην εκπαίδευση είναι πιο μεγάλο από το error στον έλεγχο για το ίδιο iteration. Αυτό είναι λογικό αφού ο έλεγχος γίνεται μετά την εκπαίδευση του δικτύου. Επίσης, με την εκπαίδευση βλέπουμε το πρόγραμμα μας να βελτιώνεται, κάτι που ήταν αναμενόμενο και το βλέπουμε μέσω της γραφικής αφού στην αρχή το error τόσο στην εκπαίδευση όσο και στον έλεγχο να είναι μεγάλο και μετά από αρκετά iterations τείνει όσο πιο πολύ γίνεται στο 0. Πρέπει να πούμε επίσης ότι φαίνεται το error τόσο στο training set όσο και στο testing set να είναι 0. Παρόλ' αυτά, αυτό είναι λάθος. Το error και στις 2 περιπτώσεις συγκλίνει προς το 0 (το error στο testing set συγκλίνει πιο πολύ από αυτό του training set) αλλά ποτέ δεν παίρνει ούτε θα πάρει την τιμή 0.