Vytěžování dat, přednáška 10: Neuronové sítě s dopřednou architekturou

Miroslav Čepek

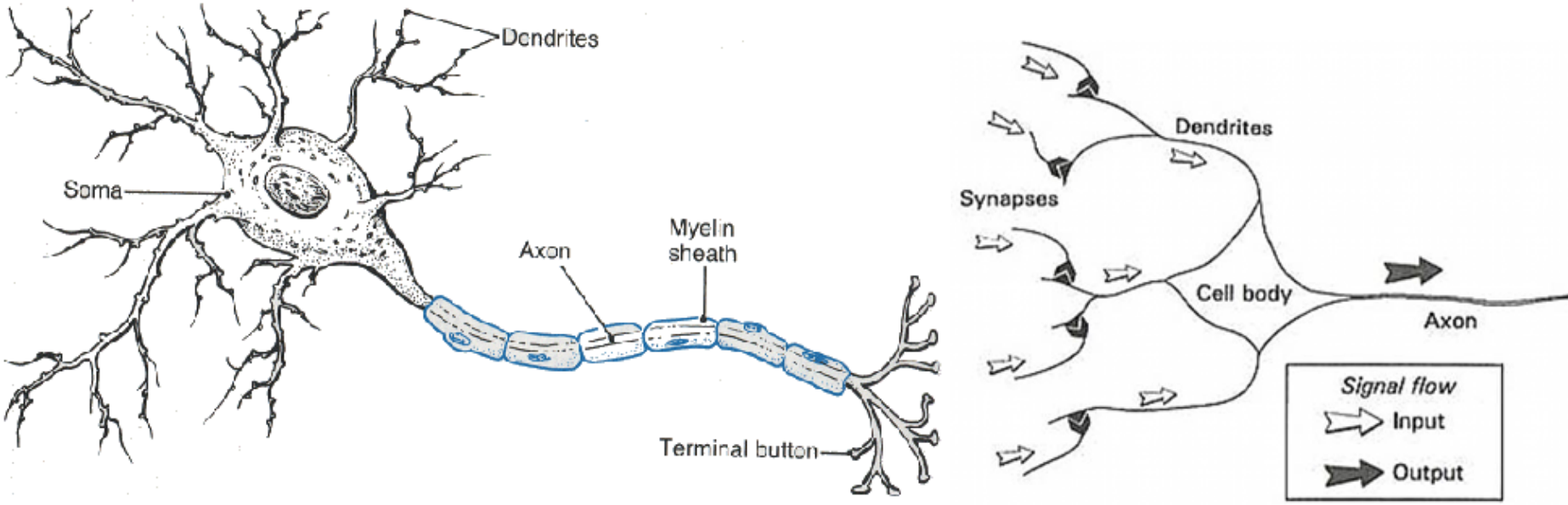
Evropský sociální fond
Praha & EU: Investujeme do vaší budoucnosti

Fakulta elektrotechnická, ČVUT

Umělé neuronové sítě

- Umělá neuronová síť je matematickým přiblížením biologické neuronové sítě. A snahou je napodobovat funkci biologických neuronových sítí.
- Umělé neuronové sítě představují jiný přístup k řešení problémů než konvenční výpočetní technika.
- Ale mezi schopnostmi umělých neuronových sítí a mozku je přecejen ještě obrovský rozdíl.

Biologická neuronová síť



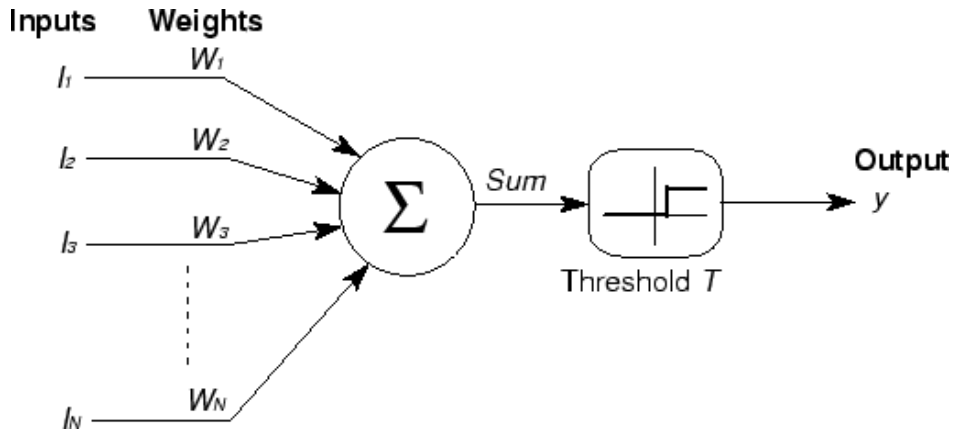
- Více si můžete přečíst například na `http://www.mindcreators.com/NeuronBasics.htm` nebo `http://www.generation5.org/content/2000/nn00.asp`.

Umělá neuronová síť

- Se skládá ze vzájemně propojených jednotek – neuronů.
- Každý neuron transformuje své vstupy na výstup. Čili umí jen velmi málo, ale jejich síla je v jejich spolupráci.
- Konekcionistivký přístup k umělé inteligenci – představa, že spoluprácí mnoha hloupých jednotek dosáhnu chování, které je kvalitativně "chytřejší" než jen součet možností jednotlivých elementů.
- Neuron při transformaci může uplantit svou lokální paměť.
- Výstupy neuronu jsou přivedeny na vstupy dalších neuronů.

Historie

- První, kdo se začal zabývat výzkumem umělých neuronových sítí byl v roce 1943 jistý profesor McCulloch a jeho žák Pitts. Oba v prvním plánu hledali matematický model biologického neuronu.
- Tento jejich model se dodnes používá a nazývá se McCulloch-Pittsův neuron.
- Občas se označuje také jako Perceptron.



http://wwwold.ece.utep.edu/research/webfuzzy/docs/kk-thesis/kk-thesis-html/node12.html

Princip práce McCulloch-Pittsova neuronu

- Na vstupy $x_1, x_2, \ldots x_n$ (na předchozím odrázku označeny jako $I_1, I_2, \ldots I_n$) předložím pozorované hodnoty.
- Tyto hodnoty přenásobím vahami $w_1, w_2, \ldots w_n$ a spočítám tzv. aktivaci neuronu.

$$a = \sum_{i=1}^{n} w_i x_i$$

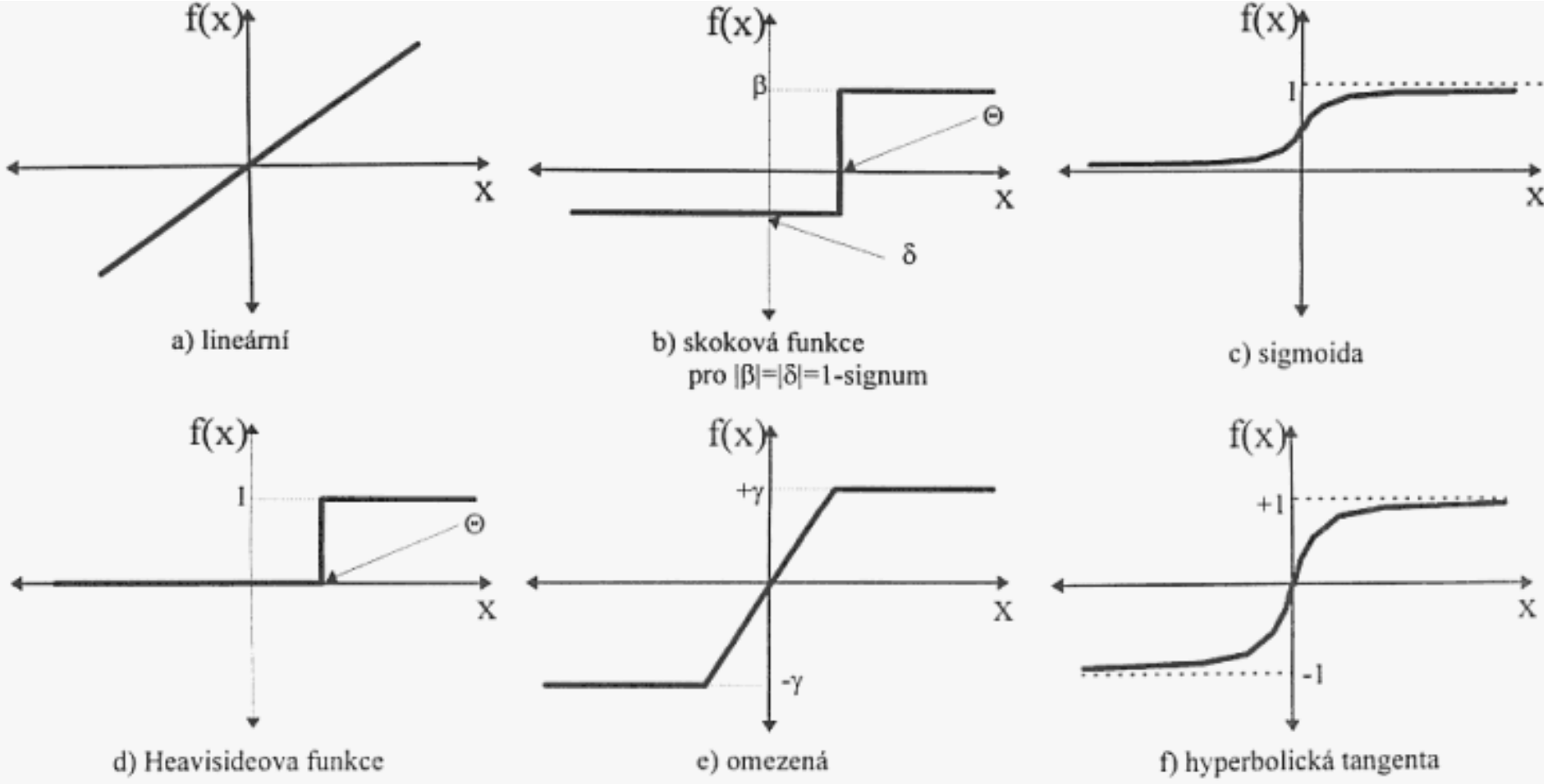
- Aktivace odpovídá aktivaci biologického neuronu. A ten "vypálí" výstup jen v případě, že aktivace překročí určitý práh.
- To se v umělých neuronových sítích simuluje pomocí aktivační funkce.
- V případě perceptronu skokovou funkcí. $f(a) = 0$, pro $a < konst$, jinak $f(a) = 1$.
- Nepřipomíná vám to něco?

Rozhodovací hranice a učení

- Jak vypadá rozhodovací hranice Perceptronu (McCulloch-Pittsova neuronu)?
- A jak nastavíme váhy?
- Přece pomocí perceptronového algoritmu!
- Jaké jsou limity perceptronu?

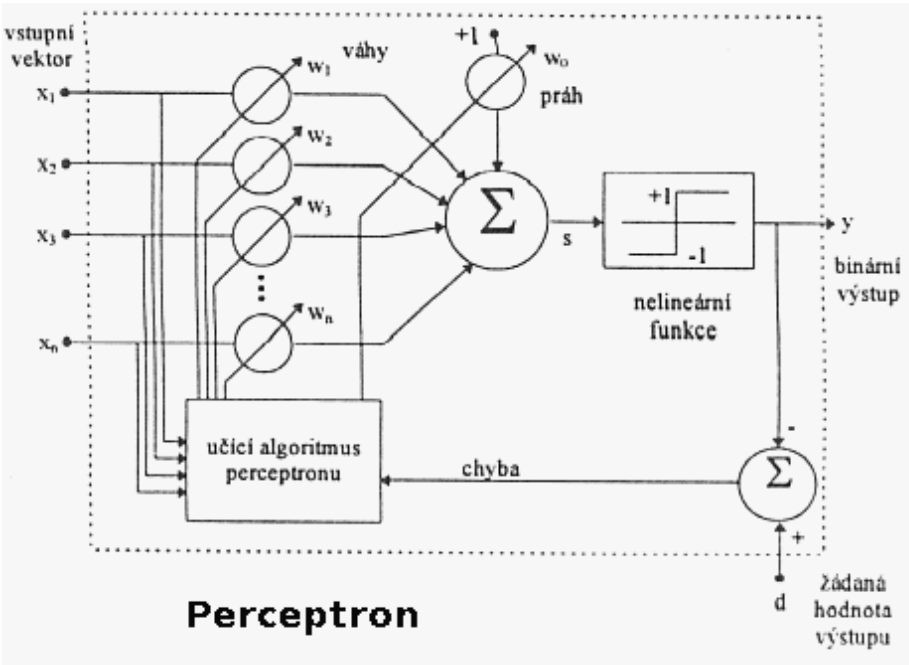
Aktivační funkce

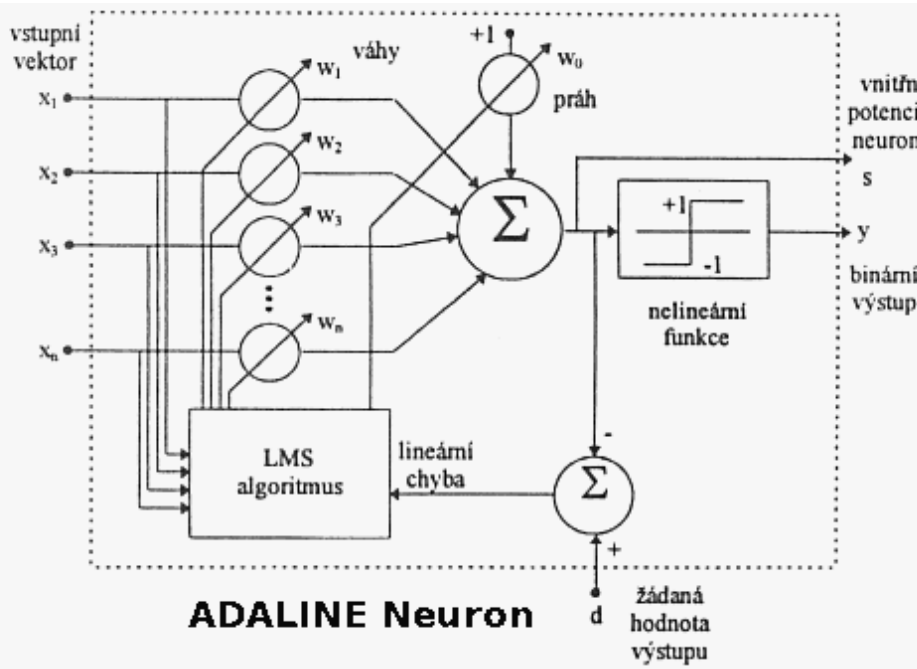
- Prvním vylepšením perceptronu jsou různé aktivační funkce, kterými se transformuje aktivaci na výstup.



ADALINE

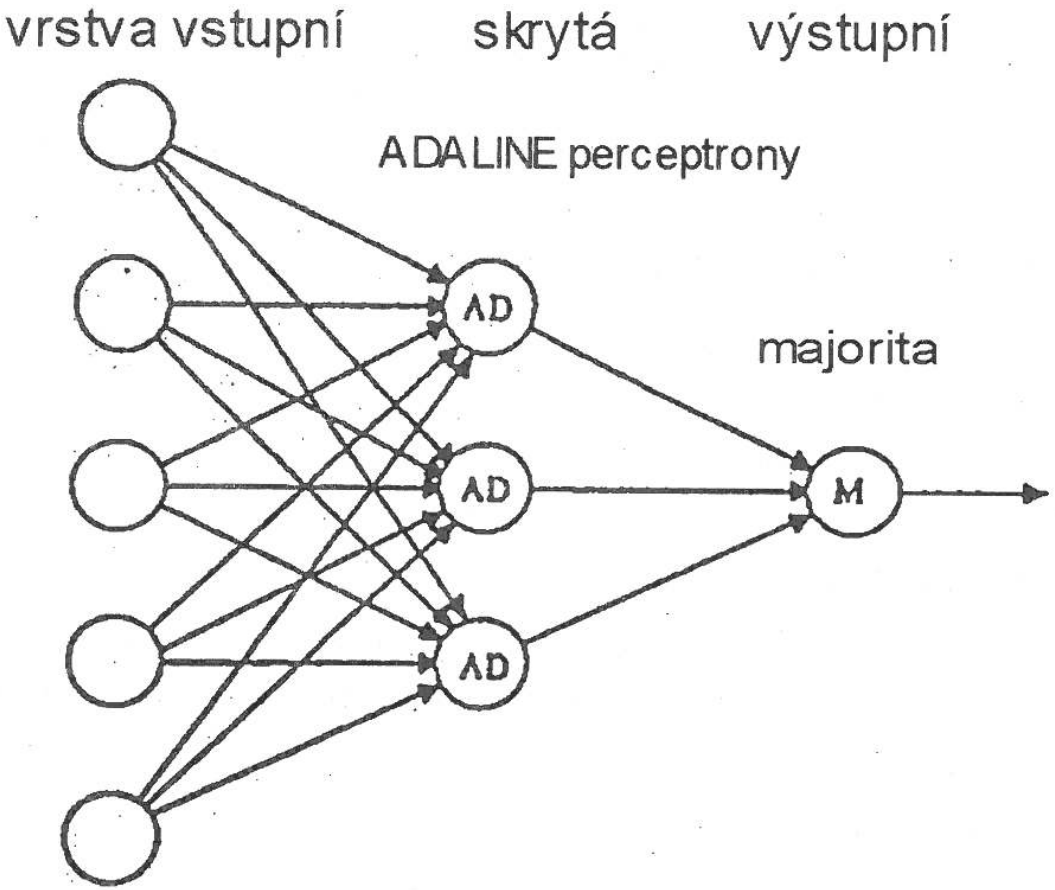
- Drobné vylepšení perceptronu, které se týká učícího algoritmu.
- Při učení se chyba nepočítá přímo z výstupu, ale z aktivace. Což znamená, že musím znát požadovanou aktivaci.





Vícevrstvá síť perceptronů – Madaline

- **MADALINE** – Multiple Adaptive Linear Element – síť s jednou skrytou vrstvou a jednou výstupní vrstvou.



MADALINE vybavování

- Výpočet odpovědi sítě na předložený vstupní vzor je jednoduchý.
- Přivedu na vstupy všech neuronů odpovídající hodnoty vstupů.
- Pro každý neuron přenásobím vstupní hodnoty vstupnímy vahami a sečtu. Tím získám aktivaci neuronu.
- Aktivaci transformuji aktivační funkcí na výstup.
- Když takto vypočítám výstupy všech neuronů, aplikuji majoritu (spočítám kolik neuronů zařadilo vzor do "třídy" 0 a kolik do "třídy" 1). A podle toho předpovím výstupní třídu sítě.

Učení MADALINE

- Učení jen nastíním – předložím vstupní vzor a spočítám výstup sítě.
- Pokud se výstup shoduje s požadovaným, nedělám nic.
- Pokud se vypočítaný a skutečný výstup liší, musím změnit váhy "nějakého" neuronu, který předpovídá špatnou třídu, aby příště "změnil názor" a tím se majorita přiklonila na správnou stranu.
- A nejjednodušší je "přesvědčit" neuron, který má aktivaci nejblíž nule. Tomuto neuronu přepočítám váhy.

Použití MADALINE

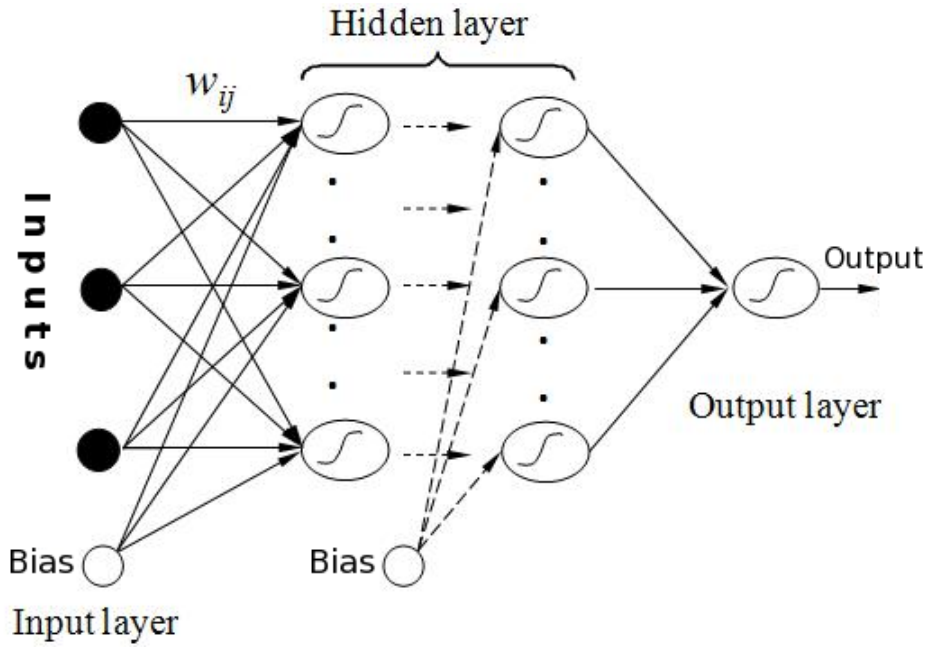
- Je dnes spíše ilustrativní.
- Učící algoritmus nezvládá komplexní úpravy a nedokáže měnit váhy neuronů dostatečně flexibilně.
- Druhý a stejně závažný problém – MADALINE z principu fungování nemůže zvládnout lineárně neseparabilné problémy. Vymyslíte proč?
- Problém dělá ta majorita...

Back Propagation

- Neuronová síť typu back propagation představuje elegantní cestu, jak se vypořádat s problémy sítě MADALINE a zároveň zvládnout učení několika skrytých vrstev.
- Podle jména dochází k zpětnému šíření – kokrétně ke zpětnému šíření chyby.
- Nejedná se v pravém slova smyslu o jednu neuronovou síť, ale označuje se tímto pojmem libovolná síť, ve které se při učení šíří chyba z výstupu zpět na vstup. Můžete narazit i na jiné back propagation síť, než o které budu vyprávět já.
- BP jsou prakticky jediným typem sítí, který je znám mimo výzkumnou komunitu zabývající se NS.

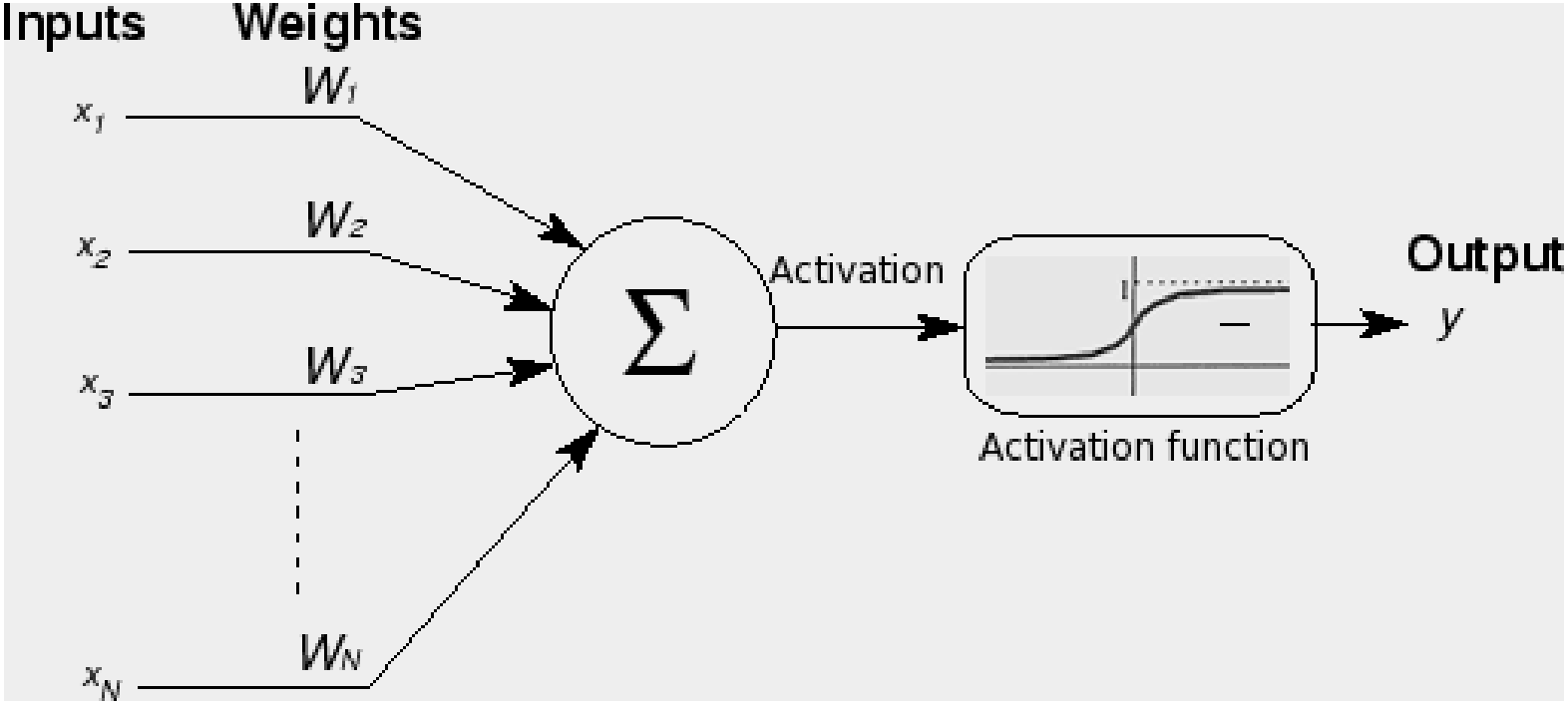
Struktura Back Propagation

- Jedná se o dopřednou síť s jednou nebo dvěma skrytými vrstvami.
- Vrstva se skládá z neuronů – jejich počet v jednotlivých vrstvách (a počet vrstev) je jedním z parametrů, který musíte určit experimentálně – tj. zkusit.
- Existuje celá teorie, která dokazuje, že k aproximaci libovolné funkce (libovolné rozhodovací hranice) stačí dvě skryté vrstvy.

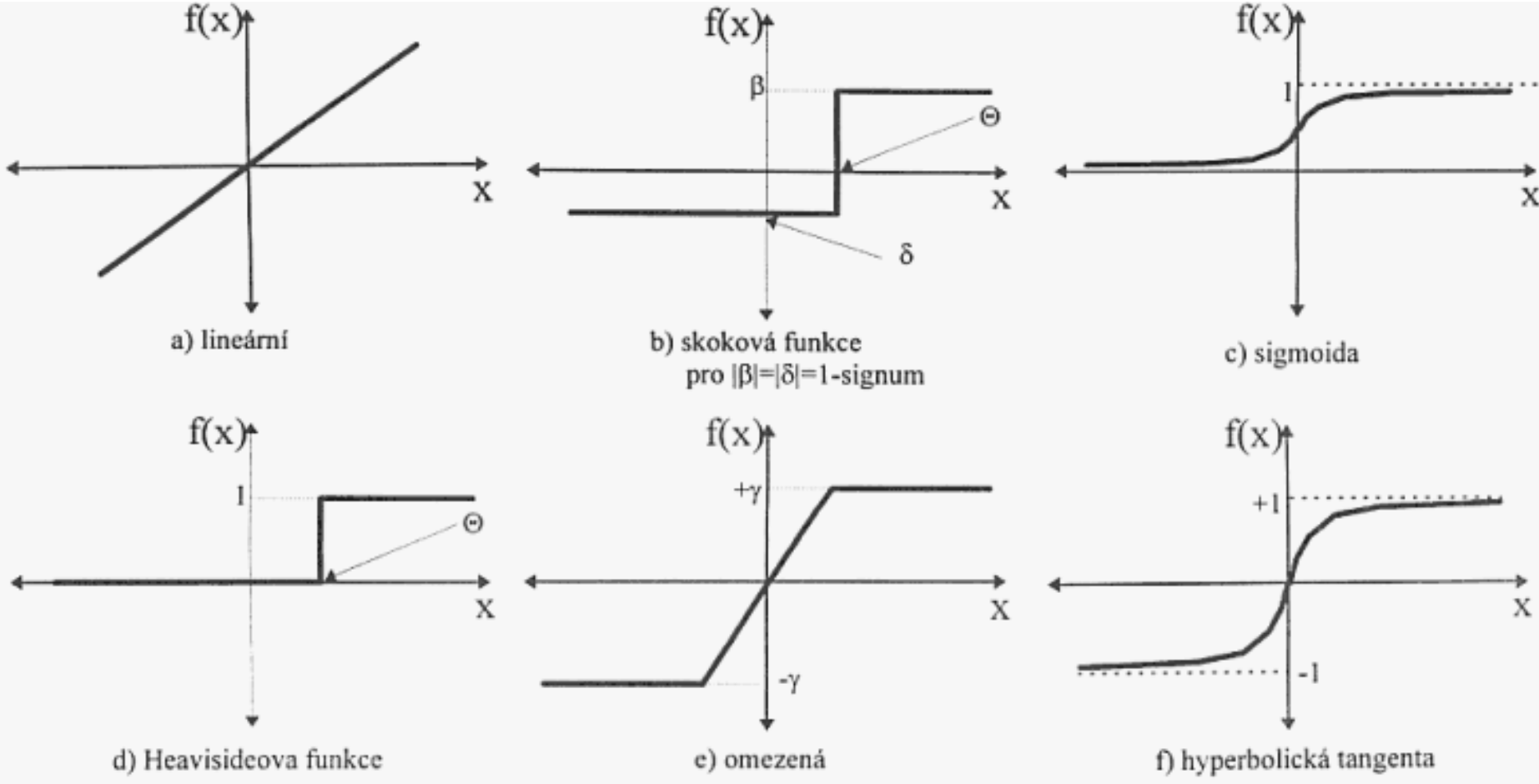


Back Propagation neuron

- Jedná se o standardní Perceptron se spojitou (!!) aktivační funkcí. Spojitost funkce budeme používat při učení – budeme počítat derivace.



Back Propagation aktivační funkce



Back Propagation učení (1)

- Učící algoritmus je trochu podobný tomu, co jsme již viděli.
- Nejprve se spočítá odpověď (výstup) sítě na předložený vstup, pak se spočítá rozdím mezi vypočítaným a požadovaným výstupem.
- Co je úplně jiné – je výpočet změny vah.
- Chyba se totiž distribuuje zpět ke vstupům a postupně se upravují váhy ve skrytých vrstvách.
- A pak se pokračuje předložením dalšího vzoru, až do té doby než dosáhneme zastavujícího kritéria.

Back Propagation učení (2)

1. Inicializuj všechny váhy všech neuronů na náhodné hodnoty.
2. Vytvoř permutaci trénovací množiny.
3. Vyber další vzor x_i z vytvořené permutace.
4. Vypočítej výstup sítě y_i.
5. Spočítej chybu (rozdíl) mezi y_i a skutečnou hodnotou d_i.
6. Postupně propaguj chybu zpět a modifikuj váhy.
7. Pokud jsi dosud nepředložil všechny prvky z trénovací množiny pokračuj bodem 3.
8. Pokud chyba přes všechny trénovací vzory je větší než zvolené kritétium, pokračuj bodem 2.

Back Propagation učení (3)

- Výpočet výstupu sítě se provádí již známým způsobem.
- Pro každý neuron, u nějž známe všechny vstupy spočítáme aktivaci.

$$a = \sum_{i=1}^{n} w_i x_i + \Theta$$

.

- Pokud znám aktivaci můžu spočítat výstup pomocí zvolené aktivační funkce.
- Pro, například, logistickou funkci tedy

$$y = \frac{1}{1 + e^{-\gamma a}}$$

- Takto postupuji pro všechny neurony, až zjistím výstup výstupního neuronu.

Back Propagation učení (4)

- Když zjistím výstup pro všechny vzory v trénovací množině, můžu zjistit globální chybu (energii) sítě.

$$E = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} (y_i - d_i)^2$$

- A snažíme se chybu (energii) minimalizovat. To se dá dělat různě a jednou z variant je gradientní sestup.
- Gradientní metoda mění váhy tak, aby energie klesla co možná nejvíc.

Back Propagation učení (4)

- "Na horách se chci dostat do údolí. Podívám se, kterým směrem se kopec nejvíc snižuje a udělám krok tím směrem. A zase se podívám, kam je to nejvíc z kopce a udělám krok. A tak dále, až jednou zjistím, že to dál nejde, čili jsem v údolí."
- V matematice existuje možnost, jak zjistit směr největšího vzestupu hodnoty funkce - gradient. To je první parciální derivace podle všech dimenzí. Když půjdu přesně opačně, půjdu ve směru největšího poklesu.

Back Propagation učení (5)

- Po chvíli derivování spočítáme (viz například skripta Miroslav Šnorek: "Neuronové sítě a neuropočítače"), dojdeme k následujícím vzorcům.

$$\delta_i^o(t) = (y_i^o - d_i)S'(\varphi)$$

- Kde $\delta_i^o(t)$ je požadovaná změna neuronu i ve výstupní vrstvě o při skutečném výstupu y_i oproti skutečnému výstupu d_i. S' je funkce inverzní k aktivační funkci a φ je aktivace neuronu.
- Změnu váhy mezi neuronem i ve vástupní vrstvě a neuronem j v první skryté vrstvě pak spočítám takto:

$$w_{ij}^o(t+1) = w_{ij}^o(t) + \Delta w_{ij}^o(t)$$

$$\Delta w_{ij}^o(t) = \eta \delta_i^o(t) y_j^h$$

- Kde y_j^h je výstup j-tého neuronu ve druhé skryté vstvě.

Back Propagation učení (6)

- Nový práh neuronu i ve výstupní vrstvě o pak spočítám takto:

$$\Theta_i^o(t+1) = \Theta_i^o(t) + \Delta\Theta_i^o(t)$$

$$\Delta\Theta_i^o(t) = \eta\delta_i^o(t)$$

Back Propagation učení (7)

- V druhé skryté vrstvě pak změnu vah vypočítám podle následujících vzorců:

$$\delta_i^h(t) = y_i^h(1 - y_i^h) \sum w_{ik}^o \delta_k^o$$

$$w_{ij}^h(t+1) = w_{ij}^h(t) + \Delta w_{ij}^h(t)$$

$$\Delta w_{ij}^h(t) = \eta \delta_i^h(t) y_j^{h-1}$$

$$\Theta_i^h(t+1) = \Theta_i^h(t) + \Delta \Theta_i^h(t)$$

$$\Delta \Theta_i^h(t) = \eta \delta_i^h(t)$$

- Kde w_{ij}^h e váha mezi neuronem i ve druhé skryté vrstvě a j v první skryté vrstvě. y_j^{h-1} je výstup j-tého neuronu v první skryté vrstvě.

Back Propagation vylepšení trénovacího algoritmu

- Všechna vylepšení směřují k tomu, abych zvýšil pravděpodobnost toho, že (rychleji) najdu globální minimum energetické funkce.
- Lze si jednoduše představit situaci, kdy gradientní sestup – tak jak jsem o něm teď mluvil – skončí v lokálním extrému. (Všechny body ve vzdálenosti 1 krok jsou výše, ale rozhodně nejsem v globálním minimu).
- Setrvačnost – při hledání směru kroku v čase $t + 1$ zohledním nejen současný gradient, ale i směr a velikost minulého kroku.
- Restart – nejde o vylepšení učícího algoritmu v pravém smyslu slova, ale pokud se sestup energetické funkce zastaví, zapamatuji si výsledek a začnu znova.
- Další podrobnosti viz. například skripta Miroslav Šnorek: Neuronové sítě a neuropočítače.

Další neuronové sítě

- Prezentované sítě nejsou zdaleka jediné, které existují. I když Back propagation je nejznámější, neznamená to, že je nejlepší, nejzajímavější a nejlépe fungující.
- Exitují například sítě, které při učení mění nejen váhy, ale i svou strukturu – sítě GMDH a GAME. Navíc mohou používat úplně jiné aktivační funkce.
- Síť s jiným typem neuronů (a v každé vrstvě jiné) – RBF síť.
- Sítě s velkými počty neuronů, kde váha mezi neurony i a j není určena zapamatovanou hodnotou, ale nějakou funkcí $w(i, j)$ – HyperNEAT (umožňuje tvořit sítě s tisíci neuronů).
- Sítě pro shlukování – SOM.

Použití neuronových sítí

- Klasifikace
- Regrese
- Shlukování
- Komprese dat
- Filtrování
- Řízení

Problémy / Nevýhody

- Umělé neurnové sítě (stejně jako cokoliv) nejsou všemocné. A na některé problémy se nehodí nebo jsou zbytečně složité. Předtím než začnete zkoušet NS zkuste se zamyslet nad následujícími otázkami:
- Dokáži jednoduše popsat řešení problému? Pokud ano, je mnohem jednodušší držet se tradičního programování.
- Mám dostatečné množství ohodnocených dat v trénovací množině?
- Musím získat absolutně přesné hodnoty na výstupu?
- Potřebuji být schopen jednoduše vysvětlit funkci modelu?

Zdroje

- http://www.mind.ilstu.edu/curriculum/modOverview.php?modGUI=212
- http://neuron.felk.cvut.cz/courseware/html/chapters.html
- skripta – Miroslav Šnorek: Neuronové sítě a neuropočítače.
- série knih – Mařík a spol: Umělá inteligence
- http://www.mindcreators.com/TableOfContents.htm