Analýza a klasifikace dat – přednáška 11

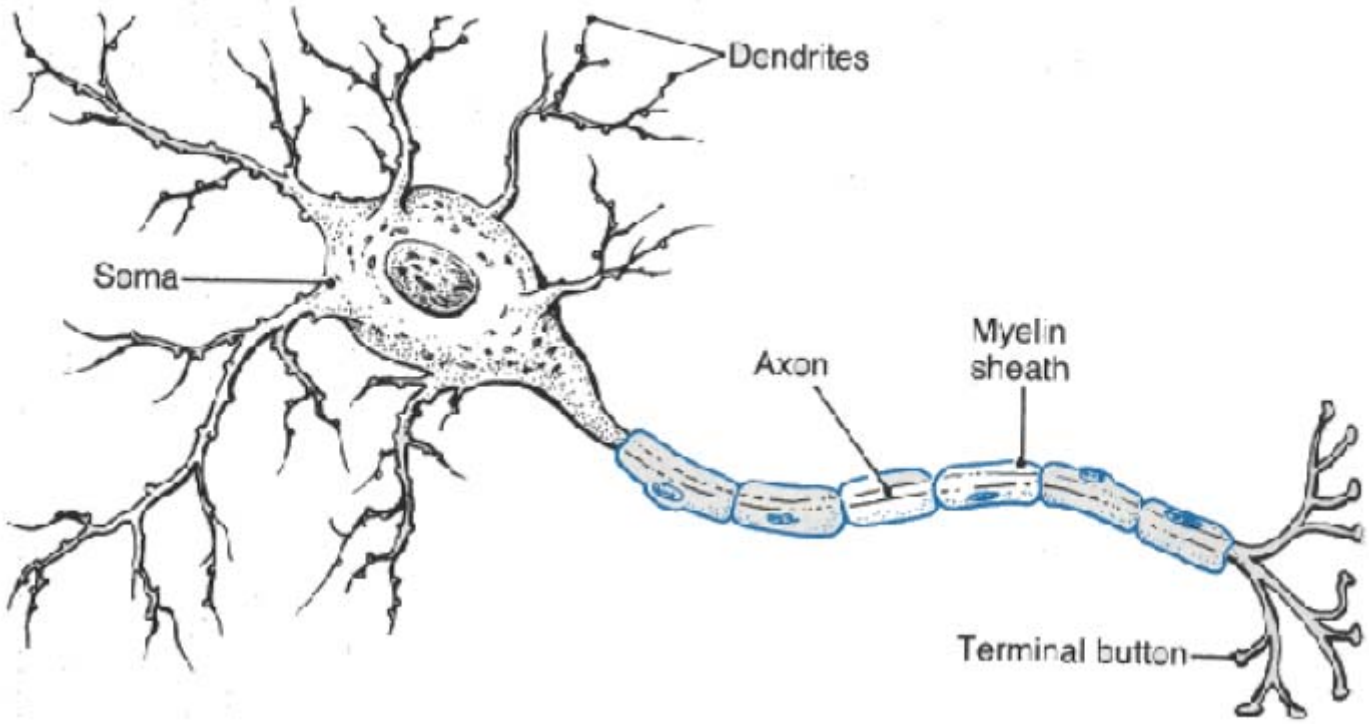
RNDr. Roman Vyškovský

Podzim 2020

Neuronové sítě

- Inspirace přírodou
- Jednotlivý neuron
- Dopředná neuronová síť
- RBF sítě
- Soutěživé sítě

Biologický neuron



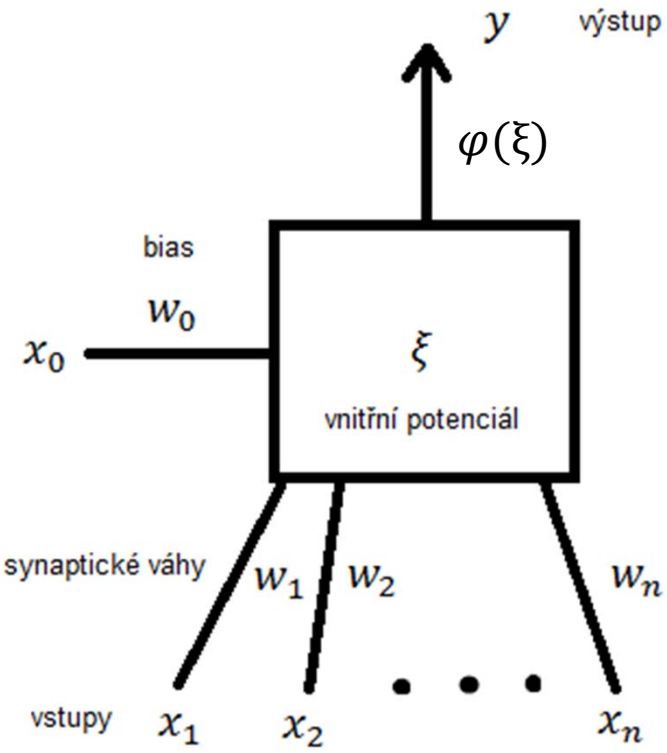
Zdroj obrázku: AnimatLab. Neuron Morphology [online]. ©2011 [cit. 2013-4-9]. Dostupné z: http://www.animatlab.com/NeuralNetworkEditor/FiringRateNeuralNet/NeuronBasics.htm

3 dynamiky

- V teorii neuronových sítí se zabýváme 3 dynamikami
  - Aktivní dynamika: výpočet odezvy neuronu resp. neuronové sítě (klasifikační třída, predikovaná hodnota) na předložený podnět (obrázek, vektor se záznamem o pacientovi)
  - Adaptační dynamika: zahrnuje proces učení neuronu (sítě)
  - Organizační dynamika: určuje topologii (počet neuronů, počet vrstev), nedává smysl u jednotlivého neuronu, pouze u neuronové sítě

Umělý neuron

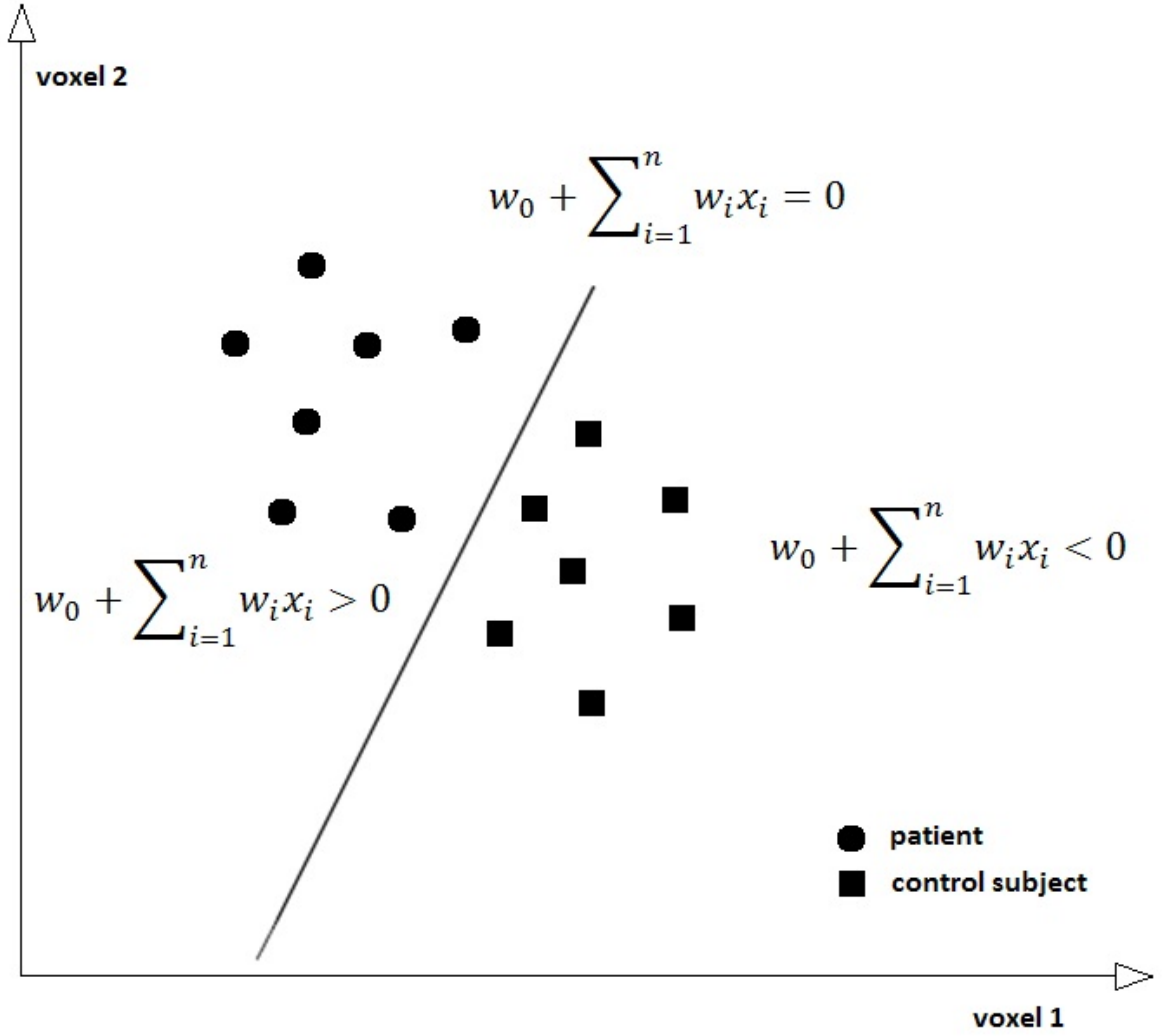
Umělý neuron



$$\xi = w_0 + \sum_{i=1}^{n} w_i x_i = w_0 + \boldsymbol{w}^T \boldsymbol{x}$$

Vnitřní potenciál

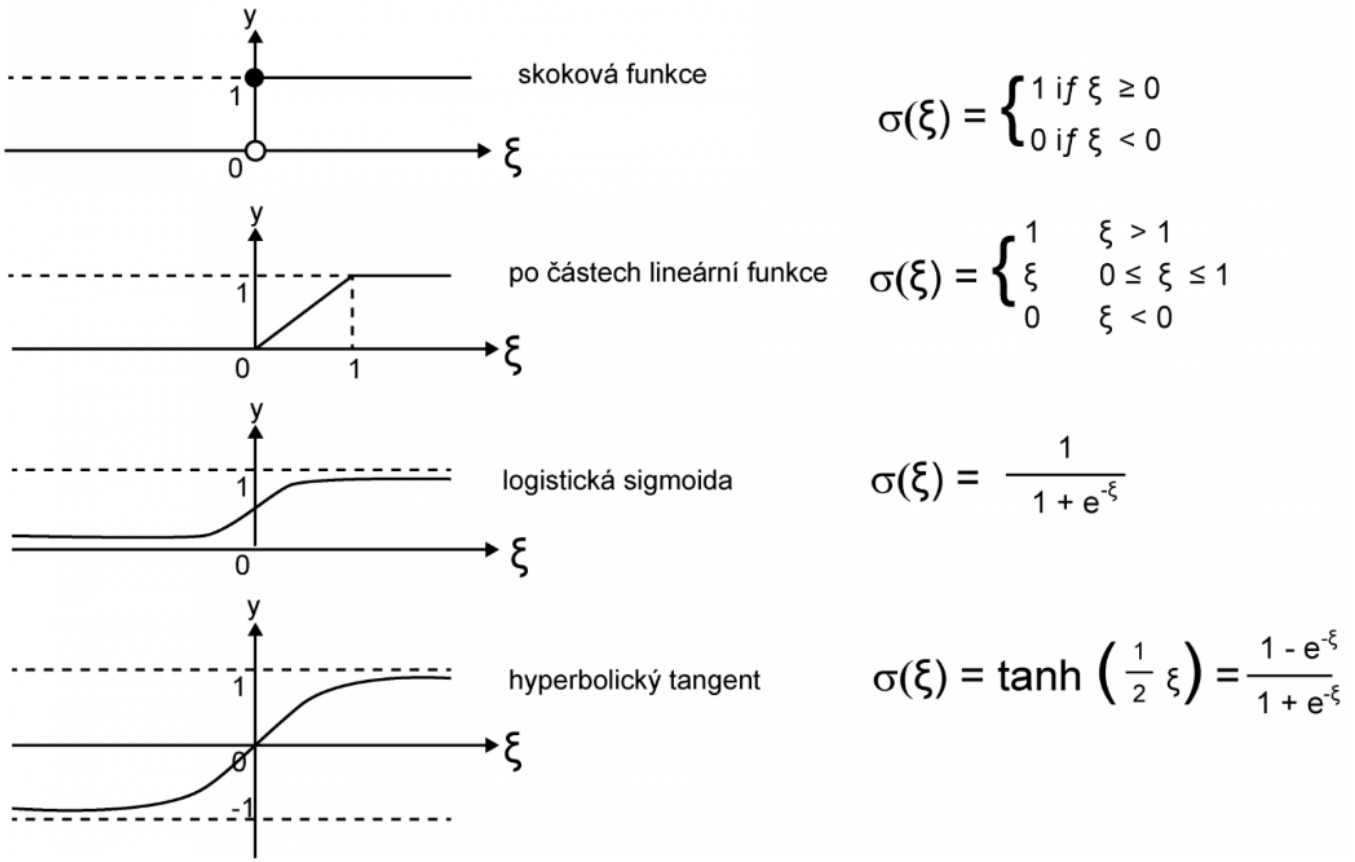
Geometrická interpretace neuronu



Aktivační funkce

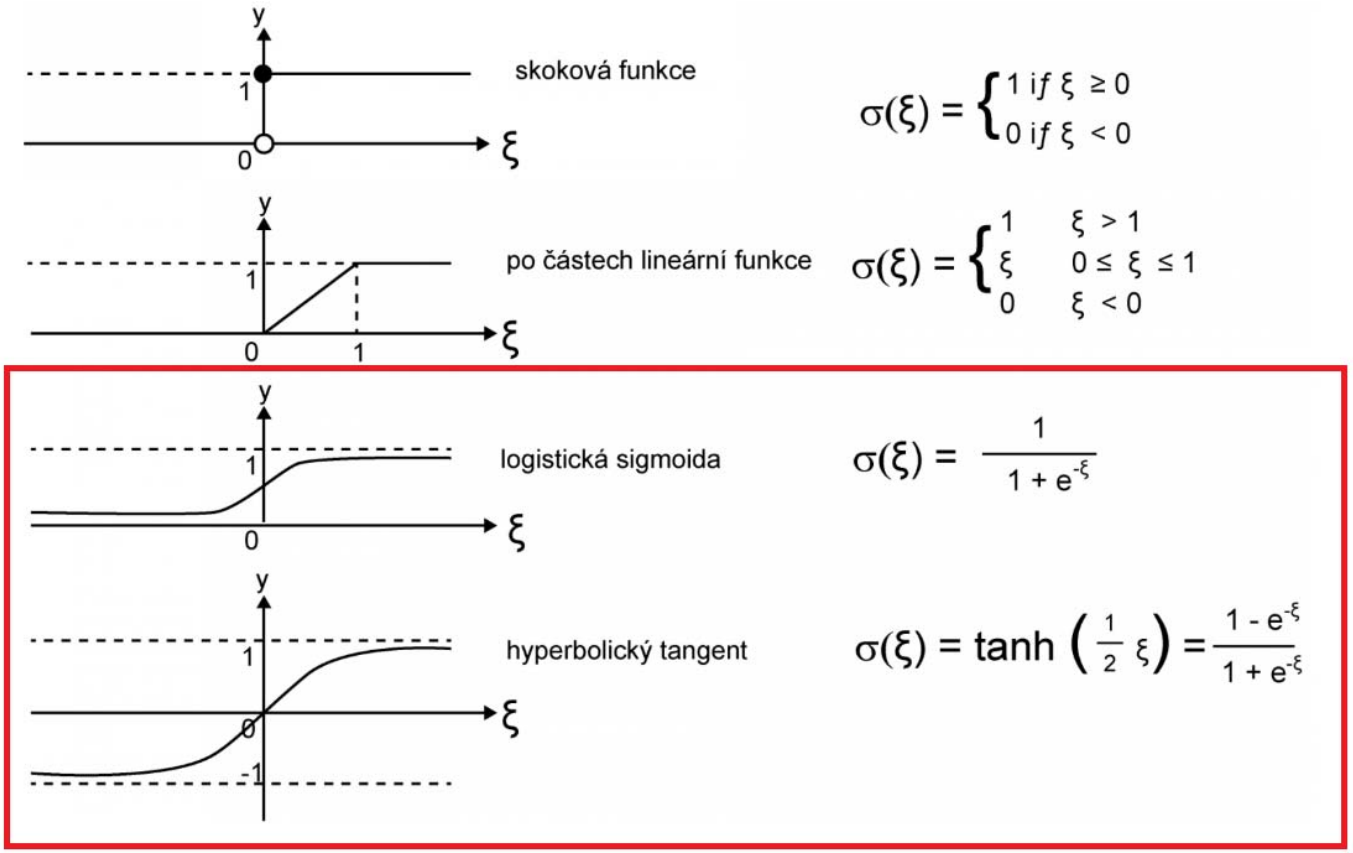
$$y = \varphi\left(w_0 + \sum_{i=1}^{n} w_i x_i\right)$$

Aktivační funkce



Obrázek převzat z el. učenice Umělá inteligence (Autor: Ing. Milan Blaha, Ph.D.)
https://portal.matematickabiologie.cz/index.php?pg=analyza-a-hodnoceni-biologickych-dat--umela-inteligence

Aktivační funkce



Nediferencovatelné funkce
- jen pro přímý výpočet vah

Diferencovatelnost funkce
- je potřeba pro učicí algoritmy založené na zpětném šíření chyby

Obrázek převzat z el. učenice Umělá inteligence (Autor: Ing. Milan Blaha, Ph.D.)
https://portal.matematickabiologie.cz/index.php?pg=analyza-a-hodnoceni-biologickych-dat--umela-inteligence

Postup učení

Učení je iterativní, přičemž jedna iterace vypadá následovně:

0. Inicializace vah
1. Předložíme vstupní vektor
2. Vypočítáme výstup sítě
3. Výstup srovnáme s očekáváným výstupem (změříme chybu)
4. Provedeme korekci vah

Epocha:

- Epochou označujeme interval, kdy předložíme všechny vzory z trénovací množiny
- Po 1 epoše zkontrolujeme, jestli bylo splněno některé kritérium pro ukončení učení, pokud ne, proces pokračuje od bodu 1 další epochou
- Epoch může být stovky, tisíce i více

Hebbovo učení

Pro neuron s binárními vstupy a binárními výstupy:

1) Neuron excitován korektně (výstup = 1, očekávaný výstup = 1)
   - Váhy vedoucí od vstupů x_i=1 se posílí o delta
2) Neuron excitován nekorektně (výstup = 1, očekávaný výstup = 0)
   - Váhy vedoucí od vstupů x_i=1 se zmenší o delta
3) Neuron neexcitován (výstup = 0)
   - Nic se neupravuje

Delta pravidlo

Pro neuron s reálnými vstupy, reálným výstupem a lineární aktivační funkcí:

$$w(n+1)_i = \mathrm{w(n)}_i + \mu(y_d - y)$$

$\mu \in (0,1)$…rychlost učení

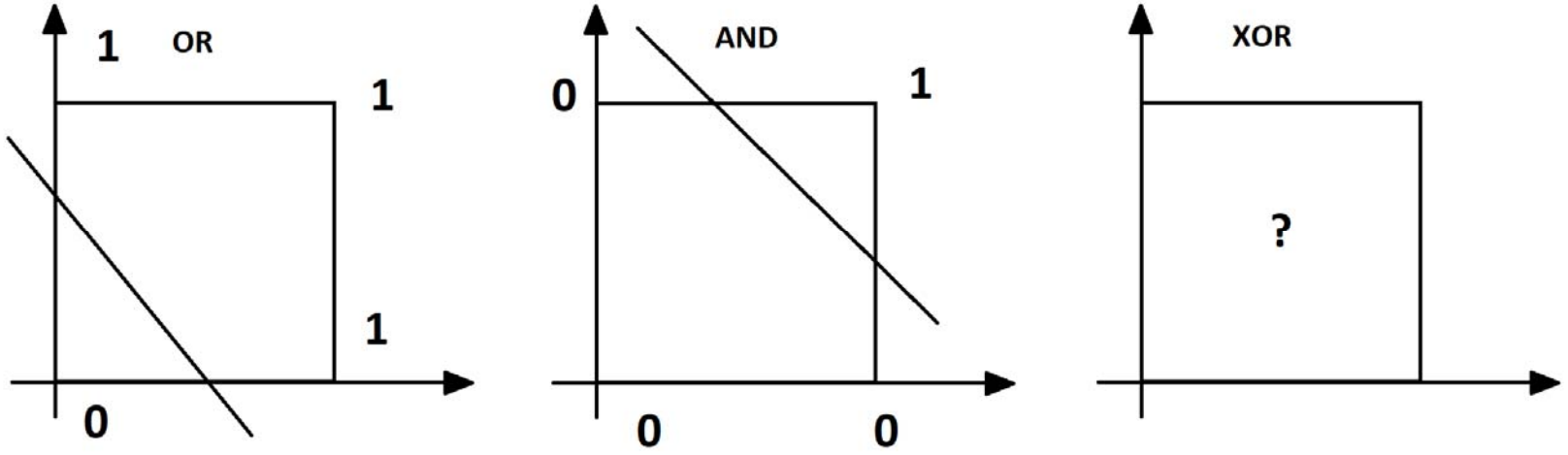
y_d…očekáváný výstup

Očekávaní	Výsledek	$\mu *?$	Posun vah
0	0	0	-
1	0	μ	Zvětší se*
0	1	-μ	Zmenší se*
1	1	0	-

*o μ-násobek rozdílu od očekávané hodnoty

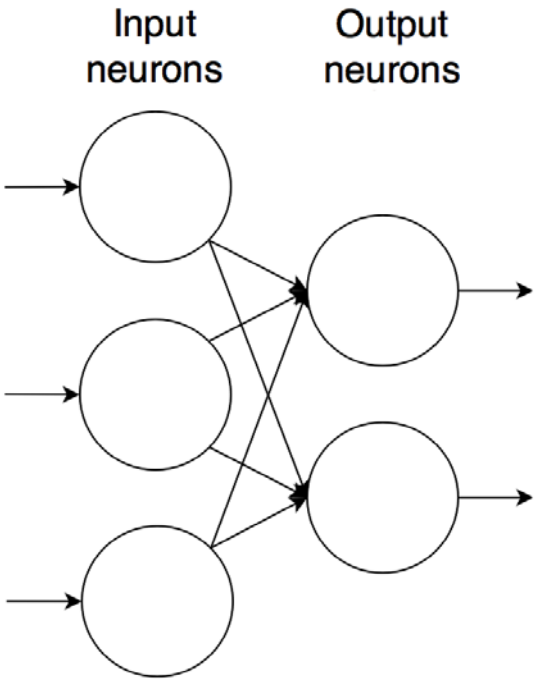
Limitace klasifikace pomocí 1 neuronu

Jeden neuron rozdělí příznakový prostor nadrovinou na 2 poloroviny, tedy umí řešit jen lineárně separovatelné problémy, v případě booleovských funkcí umí řešit např. OR a AND, ale neumí řešit XOR



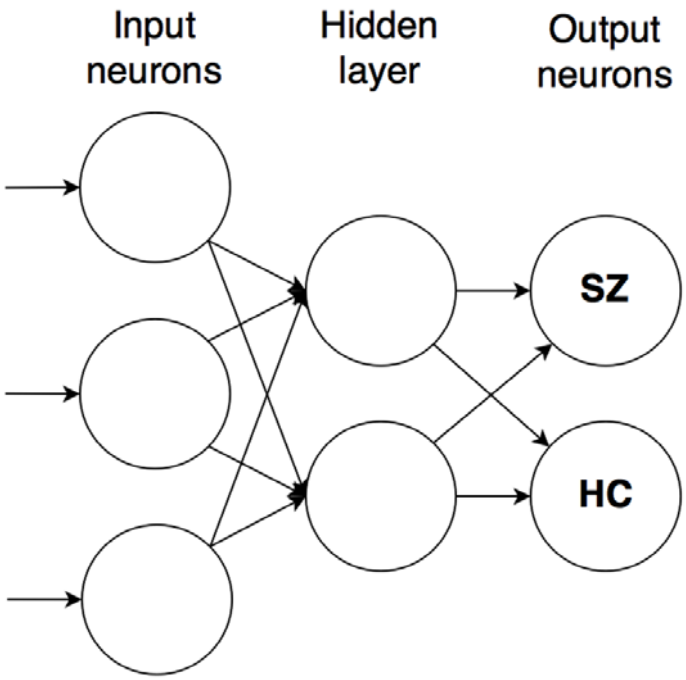
Dopředná neuronová síť

Jednovrstvý perceptron



- Zobrazení z R^n do R^m
- Úplně spojení vstupů se všemi neurony
- Neurony jsou na sobě nezávislé
- Pro klasifikaci stejně nepoužitelný jako jednovrstvý perceptron

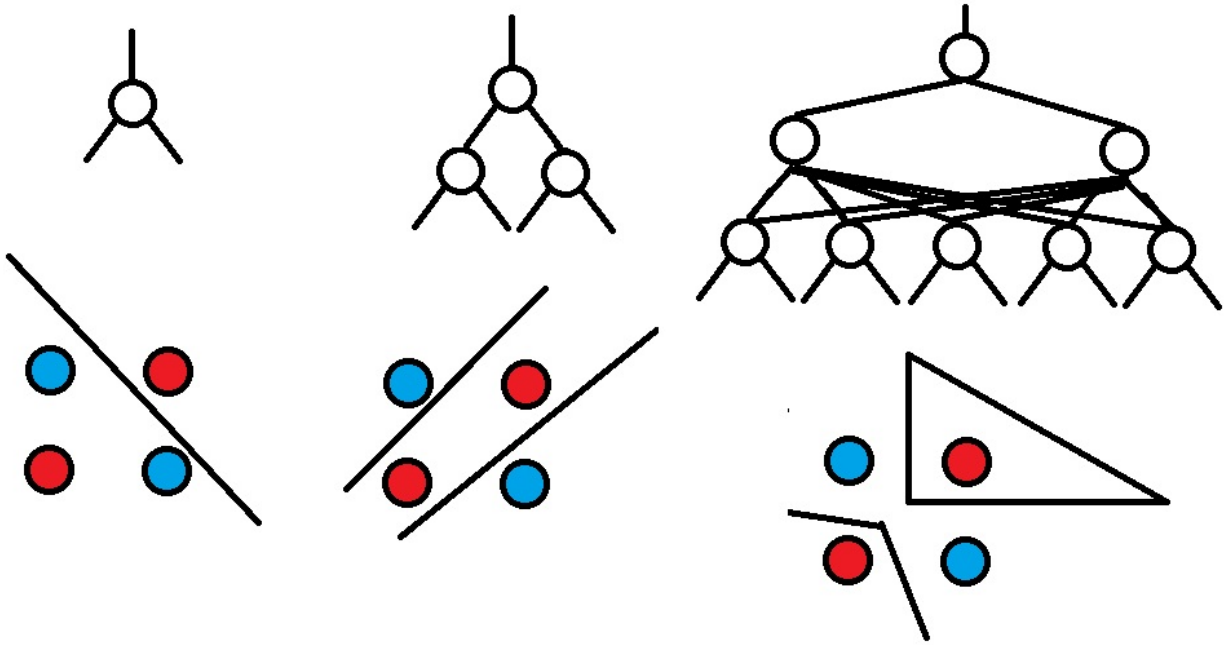
Vícevrstvý perceptron



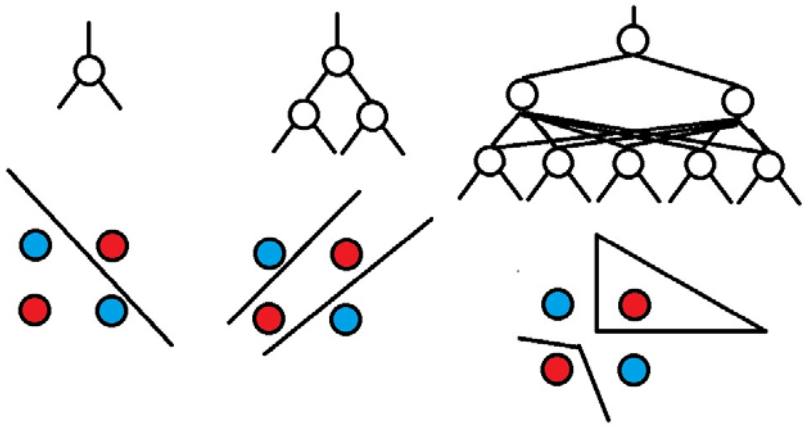
Organizační dynamika:

- NS obsahuje alespoň jednu skrytou vrstvu neuronů
- Počet neuronů skryté vrstvy může být libovolný, obvykle se počet neuronů snižuje – dochází tak k redukci informace
- Počet neuronů výstupní vrstvy zpravidla odpovídá počtu klasifikačních tříd

Klasifikační schopnost neuronové sítě



Klasifikační schopnost neuronové sítě



- Příklad!!
  - První vrstva rozdělí příznakový prostor na poloroviny
  - Druhá vrstva rozdělí prostor na konvexní podoblasti
  - Třetí vrstva provede sjednocení těchto oblastí
- NS je black box, nevíme, jak se naučí, ale tento příklad lze pomocí NS realizovat, stejně jako jakoukoliv boolovskou funkci N proměnných

Učení neuronové sítě

- Předkládáme příklady vstup – výstup
- Proces učení je iterativní a pro jeho ukončení lze využít validační množinu dat, což zaručuje nepřeučení sítě a nalezení dostatečně obecné transformace dat. Učení lze ukončit:
  - Dosažením maximálních počet epoch
  - Několik epoch po sobě nedochází ke snížení chyby
  - Dosažení požadované chyby
- NS se může naučit obtížně řešitelné úlohy
- Neuronová síť je black box, nelze nahlédnout do vnitřní struktury

Vícevrstvý perceptron

Tréninková množina T obsahuje dvojice (x_p, d_p), kde $x \in R_n$ je vstupní vektor a $d_p \in R$ očekávaná výstupní hodnota, v případě vícedimenzionálního výstupu výstupní vektor $d_p \in R_m$

Postup učení:

1. Ukážeme síti vstup x
2. Vypočítáme výstup sítě y
3. Změříme odchylku (chybu) na výstupu sítě: $\boldsymbol{e_p = d_p - y_p}$
4. **Zpětným šířením chyby** přepočítáme tuto chybu na vnitřní vrstvy sítě
5. Pro každý neuron upravíme váhy podle naměřené chyby

Chybová funkce

$$E(\boldsymbol{w}) = \sum_{k=1}^{p} E_k(\boldsymbol{w})$$

- $\boldsymbol{w}$ – vektor vah
- k – k-tý vzor
- E – suma parciálních chyb pro jednotlivé vzory, přičemž platí:

$$E_k(\boldsymbol{w}) = \frac{1}{2}\sum_{j \in Y}(y_j(\boldsymbol{w}, \boldsymbol{x}_k) - \boldsymbol{d_{kj}})^2)$$

vypočítaný výstup – očekávaný výstup

- Suma chyb přes všechny výstupní neurony
- ½ - kvůli zjednodušení derivování

Úprava vah

- Váhy jsou inicializovány náhodně kolem 0
- V t-tém kroku je váha $\boldsymbol{w}^{(t)}$ vypočítána pomocí vztahu:

$$w_{ji}^{(t)} = w_{ji}^{(t-1)} + \Delta w_{ji}^{(t)},$$

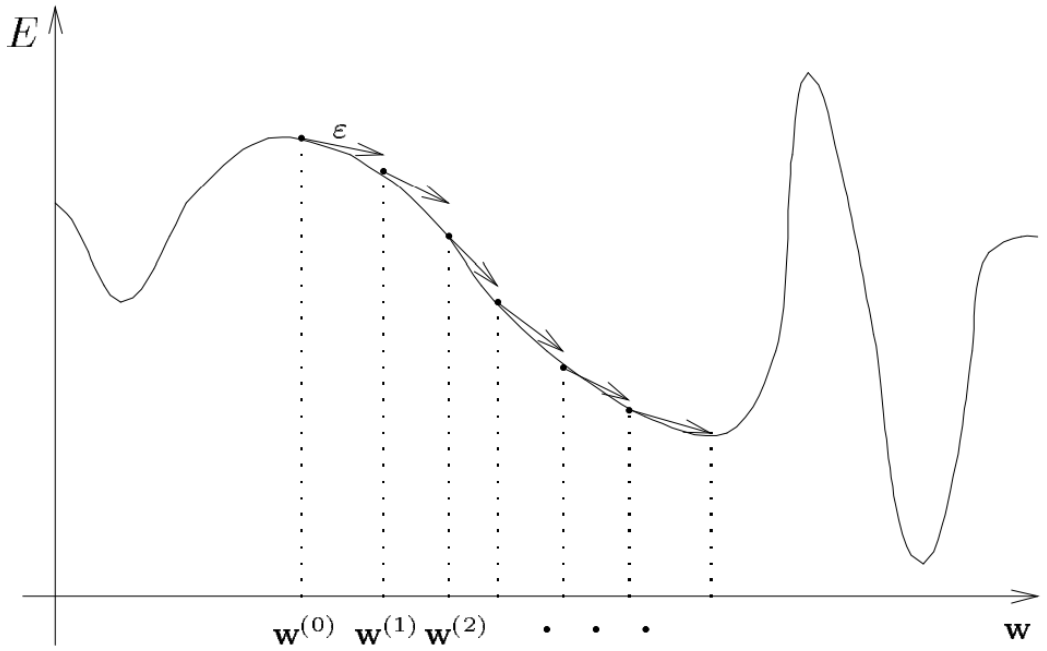
kde $w_{ji}^{(t)}$ je nový stav váhy z neuronu i do j v čase t, $w_{ji}^{(t-1)}$ je stav váhy z neuronu i do j v čase $t-1$ a $\Delta w_{ji}^{(t)}$ je změna váhy v kroku t, přičemž $t > 0$

- Změna $\Delta w_{ji}^{(t)}$ je úměrná zápornému gradientu funkce $E(w)$ v bodě $w^{(t-1)}$:

$$w_{ji}^{(t)} = w_{ji}^{(t-1)} - \varepsilon(t) \frac{\partial E}{\partial w_{ji}} \left(\boldsymbol{w}^{(t-1)}\right),$$

kde $0 < \varepsilon(t) \leq 1$ rychlost učení a $\frac{\partial E}{\partial w_{ji}} (\boldsymbol{w}^{(t-1)})$ parciální derivace chybové funkce podle w_{ji}

Úprava vah



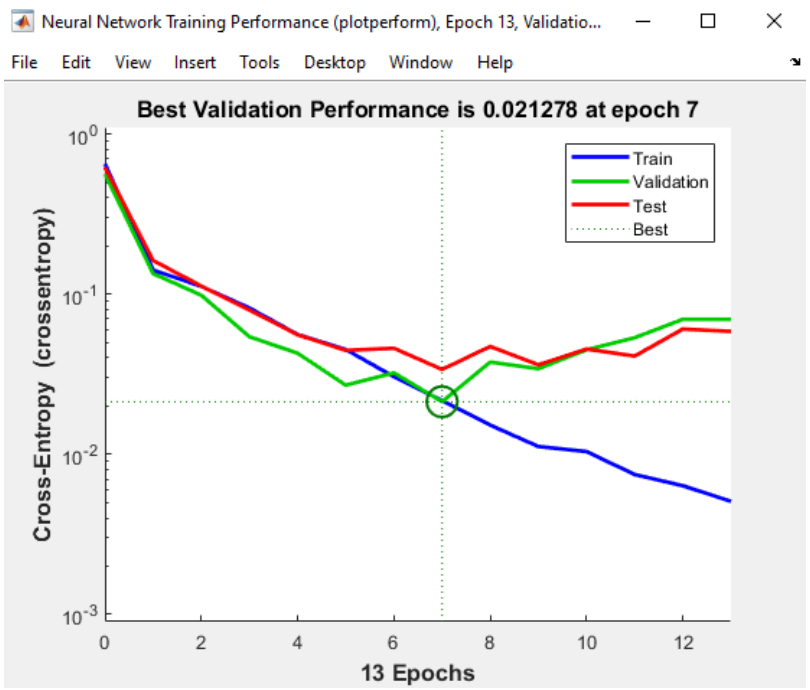
Nakonec zderivujeme chybovou funkci podle vah

$$\frac{\partial E}{\partial w_{ji}} = \sum_{k=1}^{p} \frac{\partial E_k}{\partial w_{ji}}$$

...

...

Kontrola procesu učení proti přeučení



- Využijeme validační množinu pro zastavení učení
- Na validační množině kontrolujeme bod (epochu), od kterého se klasifikace zhoršuje
- Další metoda kontroly:
  - Ve skrytých vrstvách definujeme menší počty neuronů, …

Výukové materiály

Například…

Neuron:

https://portal.matematickabiologie.cz/index.php?pg=analyza-a-hodnoceni-biologickych-dat--umela-inteligence--neuronove-site-jednotlivy-neuron

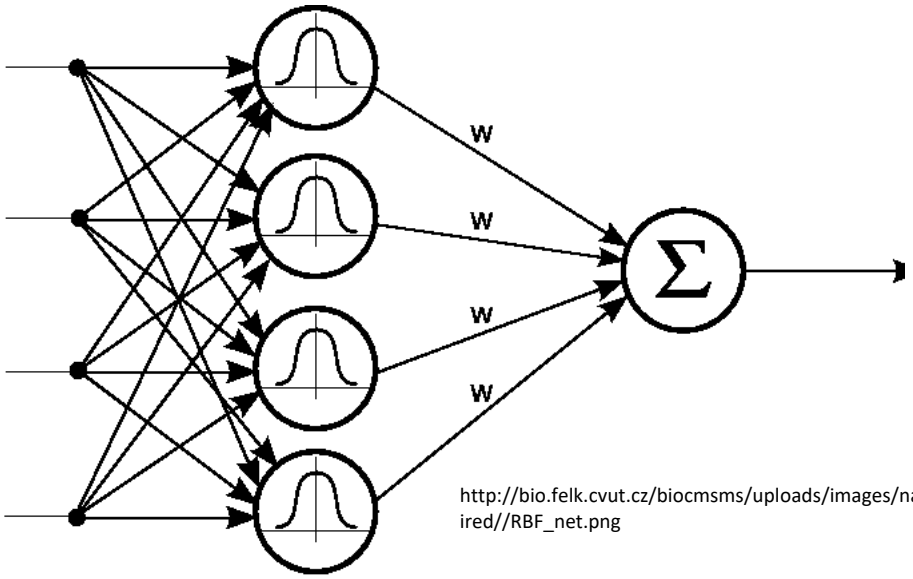
Neuronová síť:

https://portal.matematickabiologie.cz/index.php?pg=analyza-a-hodnoceni-biologickych-dat--umela-inteligence--neuronove-site-perceptrony

RBF sítě

RBF sítě

- Lokální výpočetní jednotky
- Každý neuron má definované okolí v euklidovském prostoru, kde je citlivý na vstupní vektor
- Citlivost je závislá na vzdálenosti od vstupního vektoru
- 2-vrstvé NS s úplným spojením neuronů:
  - 1. vrstva je tvořena RBF neurony
  - 2. vrstva je lineární
- Kombinace učení bez učitele a učení s učitelem



http://bio.felk.cvut.cz/biocmsms/uploads/images/nature_inspired//RBF_net.png

Výpočet RBF neuronu

- Vnitřní potenciál:

$$\xi = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} (x_i - c_i)^2}$$

kde $\boldsymbol{x} = [x_1, \dots, x_n]^T$ je vektor vstupů a $\boldsymbol{c} = [c_1, \dots, c_n]^T$ je tzv. střed

- Aktivační funkce:

$$y = \varphi(\xi) = e^{(-\frac{\xi}{\sigma})^2}$$

φ – Gaussova funkce ($\sigma \geq 0$) nebo diskrétní případ vrací 0 nebo 1 podle prahu apod.

Soutěživé sítě

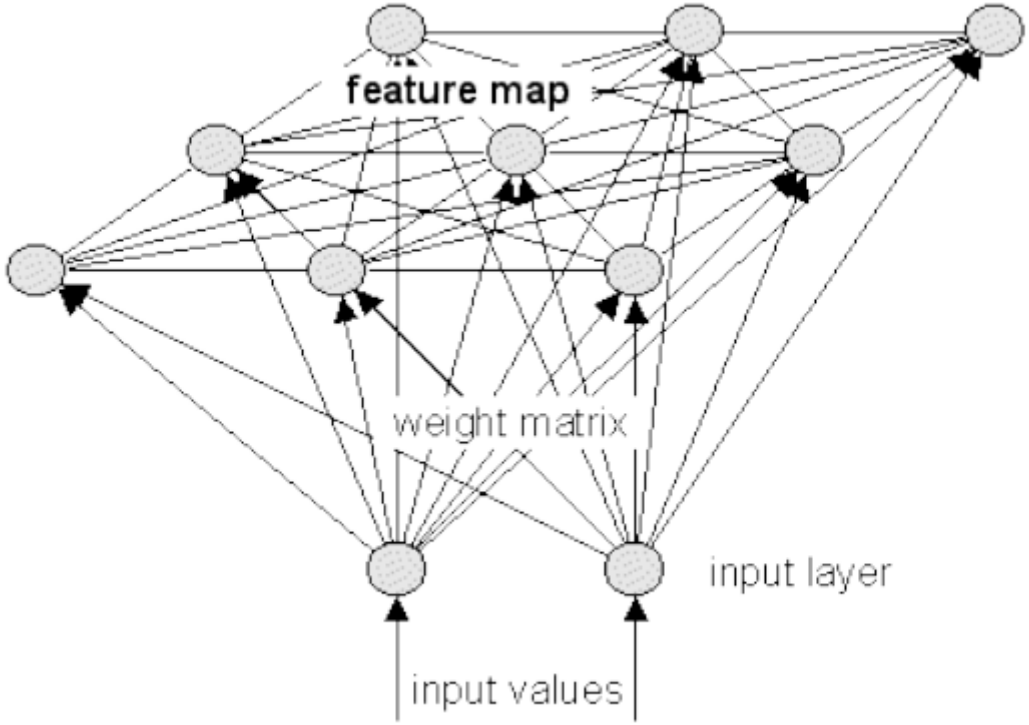
Kohonenova mapa

Vektorová kvantizace učením

Kohonenova mapa

- Jednovrstvá neuronová síť
- Využívá učení bez učitele
- Autor finský profesor Teuvo Kohonen v roce 1982
- Pro klasifikaci lze využít po doučení pomocí učení s učitelem s využitím tzv. vektorové kvantizace učením tzv. Learning Vector Quantization (LVQ algoritmus)
- Samotná mapa se využívá pro aproximaci pravděpodobnostního rozložení dat

Kohonenova mapa



Kohonenova mapa

- Náhodně se rozmístí N neuronů v příznakovém prostoru
- Neurony jsou uspořádány v mřížce
- Je nalezen nejbližší neuron

$$c = \underset{i}{\operatorname{argmin}} ||\boldsymbol{x} - \boldsymbol{m}_i||$$

- , kde c je nejbližší neuron ke vstupu x a m_i je i-tý neuron.

- Ten je posunut pomocí vztahu:

$$w_i(t+1) = w_i(t) + \alpha(t)[x(t) - w_i(t)]$$

- Kromě tohoto neuronu jsou adaptovány i neurony z okolí, které se v průběhu času zmenšuje → to zajišťuje aproximaci distribuce dat

- https://www.youtube.com/watch?v=k7DK5fnJH94&ab_channel=bitLectures

Learning vector quantization (LVQ1)

- Klasifikace podle metody nejbližšího souseda
- Učení
  - Nejprve se musí určit třídy neuronů
  - Pro každý tréninkový subjekt se najde nejbližší neuron, tento neuron je označen za reprezentanta té třídy, podle toho, pro které subjekty z trénovací množiny byl vícekrát nejbližším neuronem
  - Např. neuron č. 1 je nejbližší pro 5 pacientů a 10 kontrol → je zvolen jako reprezentant kontrol

Learning vector quantization (LVQ1)

- LVQ1 algoritmus má tyto kroky:
  - Ukaž trénovací vzor x
  - Najdi nejbližší neuron
  - Pokud je trénovací vzor x klasifikován správně → přibliž neuron
  - Pokud je trénovací vzor x klasifikován špatně → oddal neuron
  - S ostatními neurony nehýbej
- V algoritmu vystupuje rychlost učení α, která určuje velikost posunu neuronu v euklidovském prostoru (může se v průběhu času snižovat)

a) Pokud je vzor x klasifikován správně

$$w_i(t+1) = w_i(t) + \alpha(t)[x(t) - w_i(t)]$$

b) Pokud je vzor x klasifikován špatně

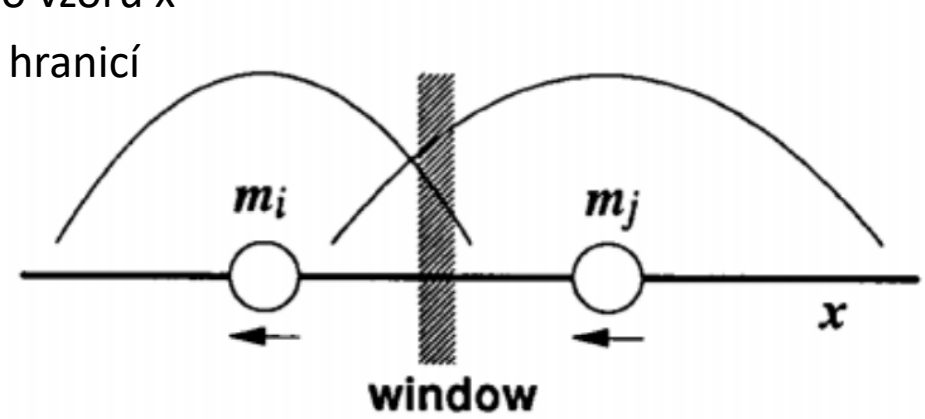
$$w_i(t+1) = w_i(t) - \alpha(t)[x(t) - w_i(t)]$$

c) Ostatní neurony

$$w_k(t+1) = w_k(t)$$

Learning vector quantization (LVQ2)

- LVQ2 algoritmus má tyto kroky:
  - Ukaž trénovací vzor x
  - Najdi 2 nejbližší neurony, pro které platí:
    - Neurony jsou kompetitivní
    - Nejbližší neuron musí klasifikovat špatně (LVQ2.1 – toto pravidlo vynechává)
    - Vstup musí být situovaný v pásmu uprostřed mezi kompetitivními neurony a nesmí být příliš blízko jednomu z nich
  - Posuň správně klasifikující neuron směrem k trénovacímu vzoru x a špatně klasifikující neuron od trénovacího vzoru x
  - Pohybuje se přímo s rozhodovací hranicí



Zdroj

- https://sci2s.ugr.es/keel/pdf/algorithm/articulo/1990-Kohonen-PIEEE.pdf