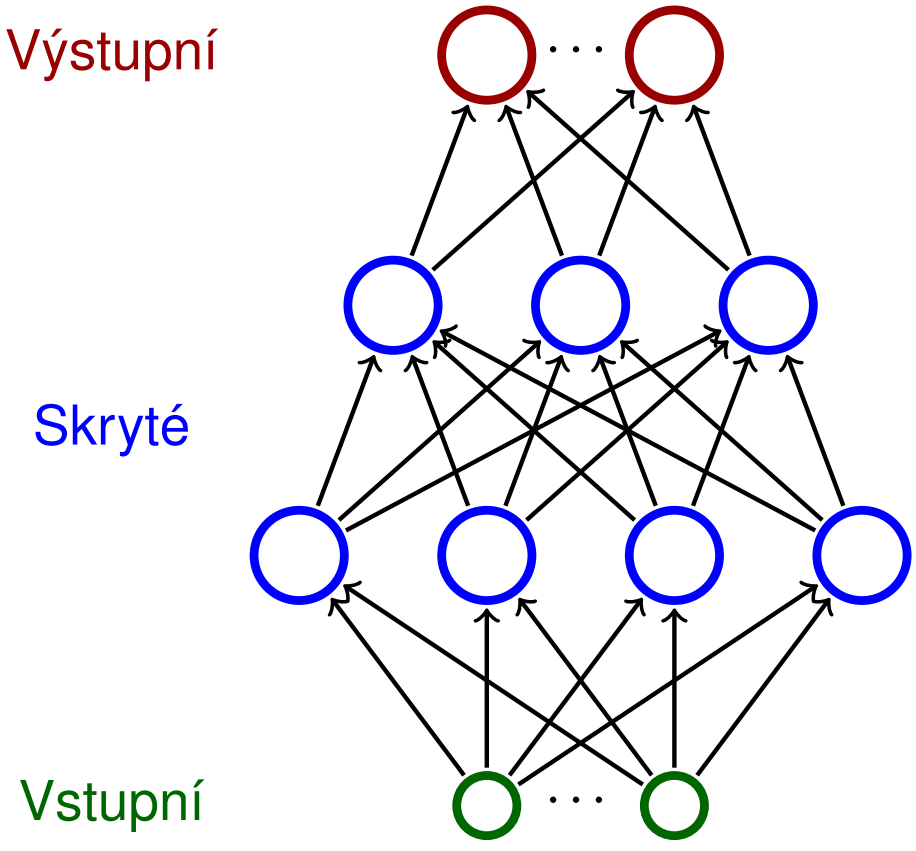
# Vícevrstvá síť

**Organizační dynamika:**




- Neurony jsou rozděleny do **vrstev** (vstupní a výstupní vrstva, obecně několik skrytých vrstev)
- Vrstvy číslujeme od 0; vstupní vrstva je nultá
  - Např. třívrstvá síť se skládá z jedné vstupní, dvou skrytých a jedné výstupní vrstvy.
- Neurony v $\ell$-té vrstvě jsou spojeny se všemi neurony ve vrstvě $\ell + 1$.
- Vícevrstvou síť lze zadat počty neuronů v jednotlivých vrstvách (např. 2-4-3-2)

# Vícevrstvá síť

**Značení:**

- Označme
  - $X$ množinu vstupních neuronů
  - $Y$ množinu výstupních neuronů
  - $Z$ množinu všech neuronů (tedy $X, Y \subseteq Z$)
- jednotlivé neurony budeme značit indexy $i, j$ apod.
- $\xi_j$ je vnitřní potenciál neuronu $j$ po skončení výpočtu
- $y_j$ je stav (výstup) neuronu $j$ po skončení výpočtu

  (zde definujeme $y_0 = 1$ jako hodnotu formálního jednotkového vstupu)
- $w_{ji}$ je váha spoje **od** neuronu $i$ **do** neuronu $j$

  (zejména $w_{j0}$ je váha speciálního jednotkového vstupu, tj. $w_{j0} = -b_j$ kde $b_j$ je bias neuronu $j$)
- $j_\leftarrow$ je množina všech neuronů, **z nichž** vede spoj do $j$ (zejména $0 \in j_\leftarrow$)
- $j^\rightarrow$ je množina všech neuronů, **do nichž** vede spoj z $j$

# Vícevrstvá síť

**Aktivní dynamika:**

- vnitřní potenciál neuronu $j$:

$$\xi_j = \sum_{i \in j_{\leftarrow}} w_{ji} y_i$$

- aktivační funkce $\sigma_j$ pro neuron $j$ je libovolná diferencovatelná funkce (upřesním později)
- Stav nevstupního neuronu $j \in Z \setminus X$ po skončení výpočtu je

$$y_j = \sigma_j(\xi_j)$$

($y_j$ závisí na konfiguraci $\vec{w}$ a vstupu $\vec{x}$, proto budu občas psát $y_j(\vec{w}, \vec{x})$ )

- Síť počítá funkci z $\mathbb{R}^{|X|}$ do $\mathbb{R}^{|Y|}$. Výpočet probíhá po vrstvách. Na začátku jsou hodnoty vstupních neuronů nastaveny na vstup sítě. V kroku $\ell$ jsou vyhodnoceny neurony z $\ell$-té vrstvy.

# Vícevrstvá síť

**Adaptivní dynamika:**

- Dána množina $\mathcal{T}$ **tréninkových vzorů** tvaru

$$\left\{ \left( \vec{x}_k, \vec{d}_k \right) \quad \middle| \quad k = 1, \ldots, p \right\}$$

kde každé $\vec{x}_k \in \mathbb{R}^{|X|}$ je vstupní vektor a každé $\vec{d}_k \in \mathbb{R}^{|Y|}$ je očekávaný výstup sítě. Pro každé $j \in Y$ označme $d_{kj}$ očekávaný výstup neuronu $j$ pro vstup $\vec{x}_k$
(vektor $\vec{d}_k$ lze tedy psát jako $\left(d_{kj}\right)_{j \in Y}$).

- **Chybová funkce:**

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

kde

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

# Vícevrstvá síť - učící algoritmus

**Dávkový algoritmus (gradientní sestup):**

Algoritmus počítá posloupnost vektorů vah $\vec{w}^{(0)}, \vec{w}^{(1)}, \ldots$.

- váhy v $\vec{w}^{(0)}$ jsou inicializovány náhodně blízko 0
- v $t$-tém kroku (zde $t = 1, 2, \ldots$) je $\vec{w}^{(t)}$ vypočteno takto:

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

kde

$$\Delta w_{ji}^{(t)} = -\varepsilon(t) \cdot \frac{\partial E}{\partial w_{ji}}(\vec{w}^{(t-1)})$$

je změna váhy $w_{ji}$ v $t$-tém kroku a $0 < \varepsilon(t) \leq 1$ je rychlost učení v $t$-tém kroku.

Všimněte si, že $\frac{\partial E}{\partial w_{ji}}(\vec{w}^{(t-1)})$ je komponenta gradientu $\nabla E$, tedy změnu vah v $t$-tém kroku lze zapsat také takto: $\vec{w}^{(t)} = \vec{w}^{(t-1)} - \varepsilon(t) \cdot \nabla E(\vec{w}^{(t-1)})$.

# Vícevrstvá síť - učící algoritmus

**Online algoritmus:**

Algoritmus počítá posloupnost vektorů vah $\vec{w}^{(0)}, \vec{w}^{(1)}, \ldots$.

- váhy v $\vec{w}^{(0)}$ jsou inicializovány náhodně blízko 0
- v $t$-tém kroku (zde $t = 1, 2, \ldots$) je $\vec{w}^{(t)}$ vypočteno takto:

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

kde

$$\Delta w_{ji}^{(t)} = -\varepsilon(t) \cdot \frac{\partial E_k}{\partial w_{ji}}(w_{ji}^{(t-1)})$$

kde $k = ((t-1) \mod p) + 1$ a $0 < \varepsilon(t) \leq 1$ je rychlost učení v $t$-tém kroku.

Lze použít i **stochastickou verzi** tohoto algoritmu, v níž je $k$ voleno náhodně z $\{1, \ldots, p\}$.

# Vícevrstvá síť - gradient chybové funkce

Pro každé $w_{ji}$ máme

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

kde pro každé $k = 1, \ldots, p$ platí

$$\frac{\partial E_k}{\partial w_{ji}} = \frac{\partial E_k}{\partial y_j} \cdot \sigma_j'(\xi_j) \cdot y_i$$

a pro každé $j \in Z \setminus X$ dostaneme

$$\frac{\partial E_k}{\partial y_j} = y_j - d_{kj} \qquad \text{pro } j \in Y$$

$$\frac{\partial E_k}{\partial y_j} = \sum_{r \in j^{\rightarrow}} \frac{\partial E_k}{\partial y_r} \cdot \sigma_r'(\xi_r) \cdot w_{rj} \qquad \text{pro } j \in Z \setminus (Y \cup X)$$

(Zde všechna $y_j$ jsou ve skutečnosti $y_j(\vec{w}, \vec{x}_k)$).

# Vícevrstvá síť - gradient chybové funkce

- Pokud $\sigma_j(\xi) = \frac{1}{1+e^{-\lambda_j \xi}}$ pro každé $j \in Z$ pak

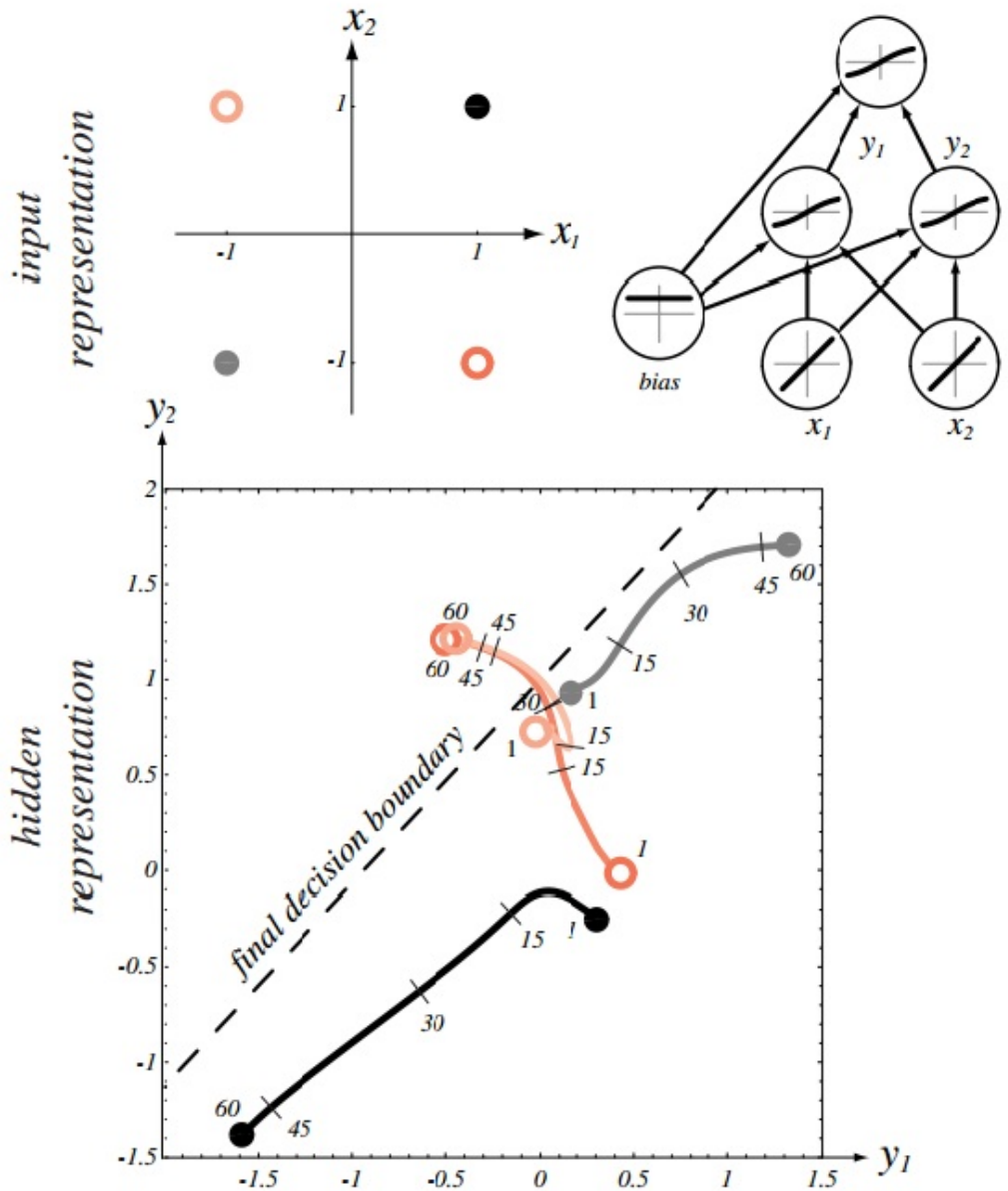
$$\sigma_j'(\xi_j) = \lambda_j y_j (1 - y_j)$$

a dostaneme přesně gradient z minulé přednášky.

- Pokud $\sigma_j(\xi) = a \cdot \tanh(b \cdot \xi_j)$ pro každé $j \in Z$ pak

$$\sigma_j'(\xi_j) = \frac{b}{a}(a - y_j)(a + y_j)$$

# Ilustrace gradientního sestupu - XOR




Zdroj: Pattern Classification (2nd Edition); Richard O. Duda, Peter E. Hart, David G. Stork

# Praktické otázky gradientního sestupu

- Otázky týkající se efektivity učení:
  - Dávkový nebo online algoritmus?
  - Je nutné data předzpracovat?
  - Jak volit iniciální váhy?
  - Je nutné vhodně volit požadované hodnoty sítě?
  - Jak volit rychlost učení $\varepsilon(t)$ ?
  - Dává gradient nejlepší směr změny vah?
- Otázky týkající se výsledného modelu:
  - Kdy zastavit učení?
  - Kolik vrstev sítě a jak velkých?
  - Jak velkou tréninkovou množinu použít?
  - Jak zlepšit vlastnosti (přesnost a schopnost generalizace) výsledného modelu?

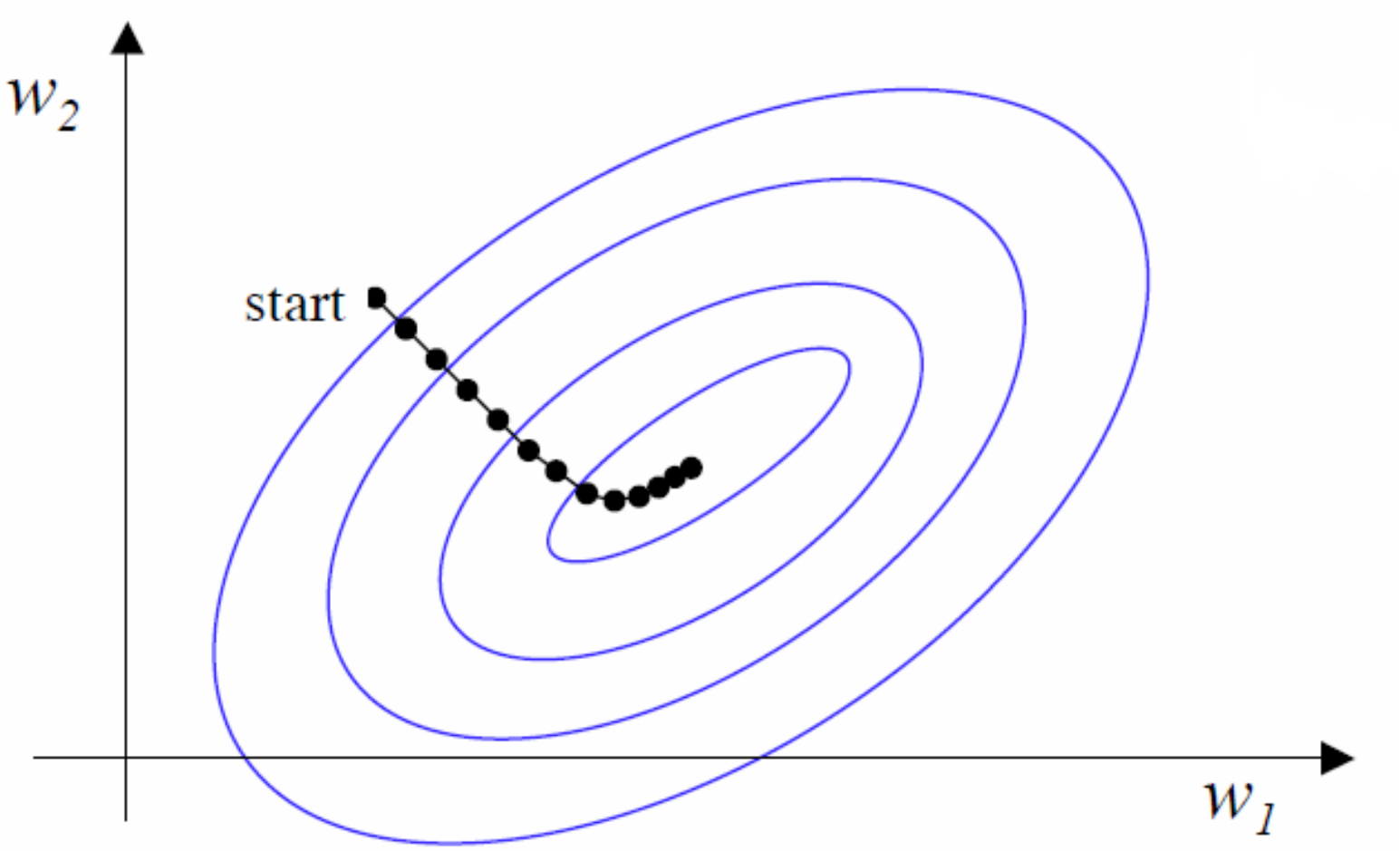
# Poznámky o konvergenci gradientního sestupu

- Chybová funkce může být velmi komplikovaná:
  - může obsahovat mnoho lokálních minim, učící algoritmus v nich může skončit
  - může obsahovat mnoho „plochých“ míst s velmi malým gradientem, zejména pokud se aktivační funkce tzv. saturují (tedy jejich hodnoty jsou blízko extrémům; v případě sigmoidálních funkcí to znamená, že mají velké argumenty)
  - může obsahovat velmi strmá místa, což vede k přeskočení minim gradientním sestupem
- pro velmi malou rychlost učení máme větší šanci dokonvergovat do lokálního minima, ale konvergence je hodně pomalá

  Teorie: pokud $\varepsilon(t) = \frac{1}{t}$ pak dávkový i stochastický gradientní sestup konvergují k lokálnímu minimu (nicméně extrémně pomalu).
- pro příliš velkou rychlost učení může vektor vah střídavě přeskakovat minimum nebo dokonce divergovat

# Gradientní sestup - ilustrace

Gradientní sestup s malou rychlostí učení:

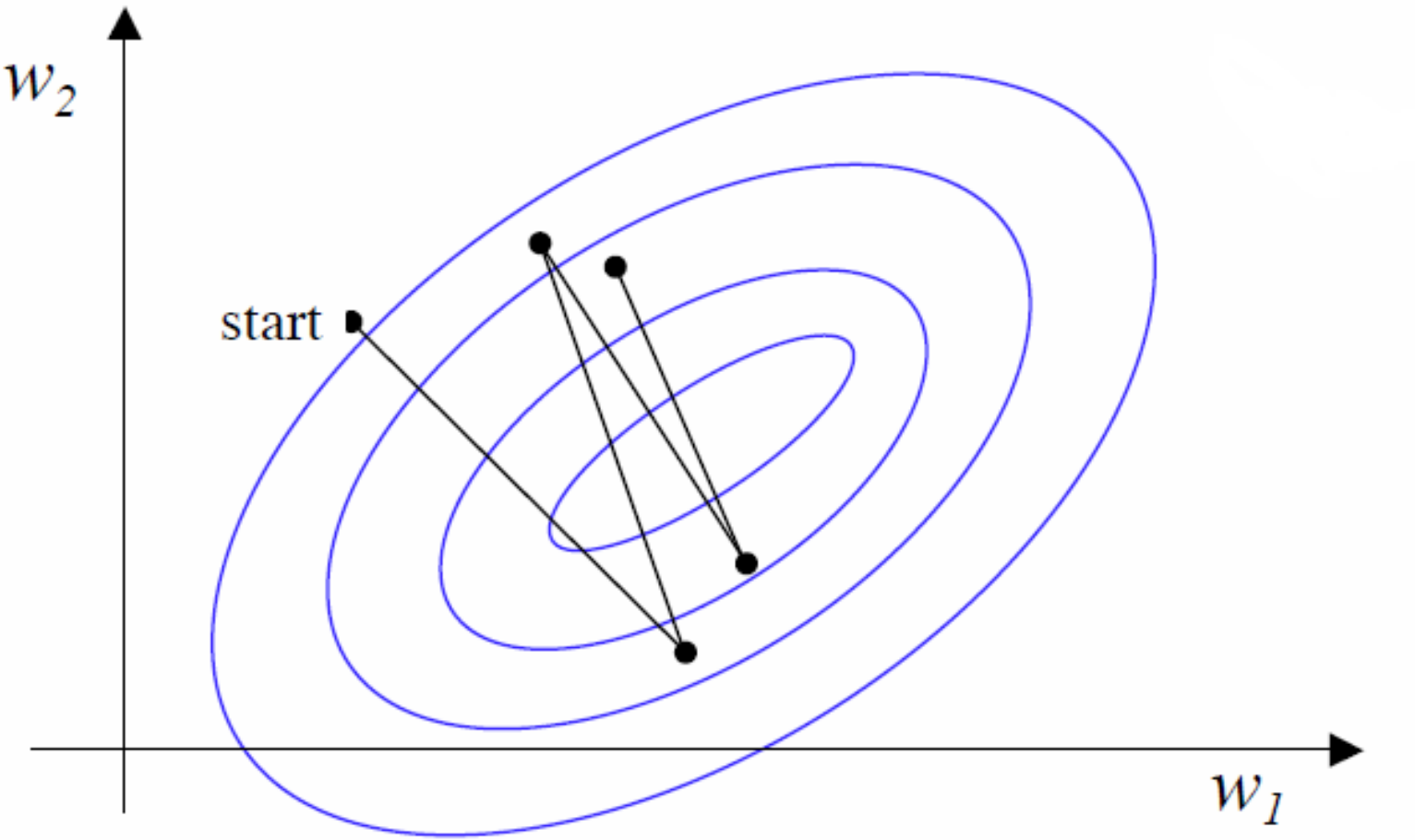



Více méně hladká křivka, každý krok je kolmý na vrstevnici.

Obrázek: Neural Computation, Dr John A. Bullinaria

# Gradientní sestup - ilustrace

Gradientní sestup s příliš velkou rychlostí učení:

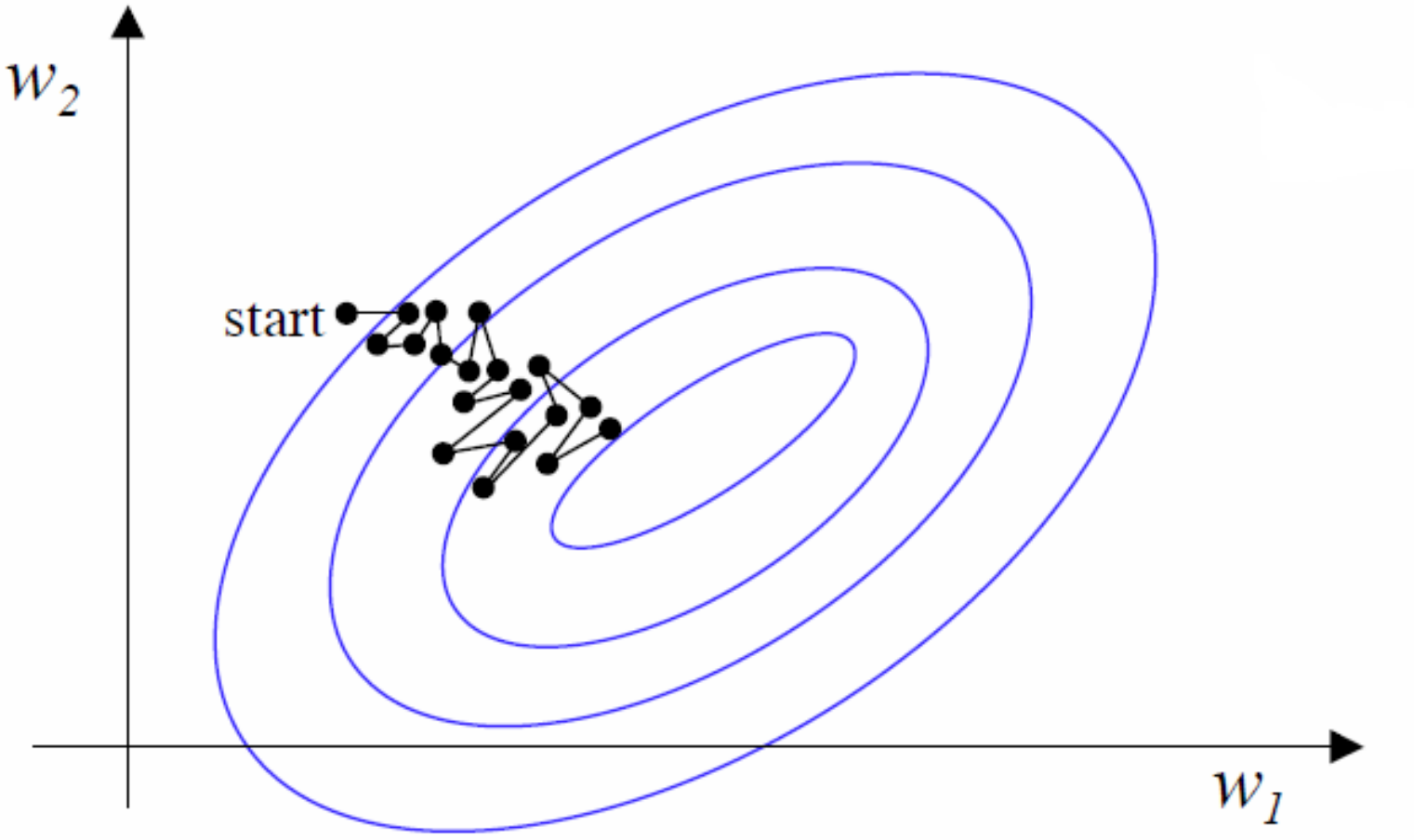



Jednotlivé kroky přeskakují minimum, učení je pomalé.

Obrázek: Neural Computation, Dr John A. Bullinaria

# Gradientní sestup - ilustrace

Online učení:




Kroky nemusí být kolmé na vrstevnice, může hodně kličkovat.

Obrázek: Neural Computation, Dr John A. Bullinaria

# Dávkový vs online učící algoritmus

Výhody dávkového:

- realizuje přesně gradientní sestup pro chybovou fci (většinou konverguje k lokálnímu minimu)
- snadno paralelizovatelný (vzory je možné zpracovávat odděleně)

Nevýhody dávkového:

- paměťová náročnost (musí si pamatovat chyby všech vzorů)
- redundantní data nepřidávají informaci ke gradientu.

Výhody online (stochastického)

- stochastický má šanci uniknout z okolí mělkého minima (protože nerealizuje přesný grad. sestup)
- má menší paměťovou náročnost a snadno se implementuje
- je rychlejší, zejména na hodně redundantních datech

Nevýhody online (stochastického)

- není vhodný pro paralelizaci
- může hodně „kličkovat“ (více než gradientní sestup)

# Moment

Problémy s gradientním sestupem:

- Může se stát, že gradient $\nabla E(\vec{w}^{(t)})$ neustále mění směr, ale chyba se postupně zmenšuje.

  Toto často nastává, pokud jsme v mělkém údolí, které se mírně svažuje jedním směrem (něco jako U-rampa pro snowboarding, učící algoritmus potom opisuje dráhu snowboardisty)
- Online algoritmus také může zbytečně kličkovat.

  Tento algoritmus se vůbec nemusí pohybovat ve směru největšího spádu!

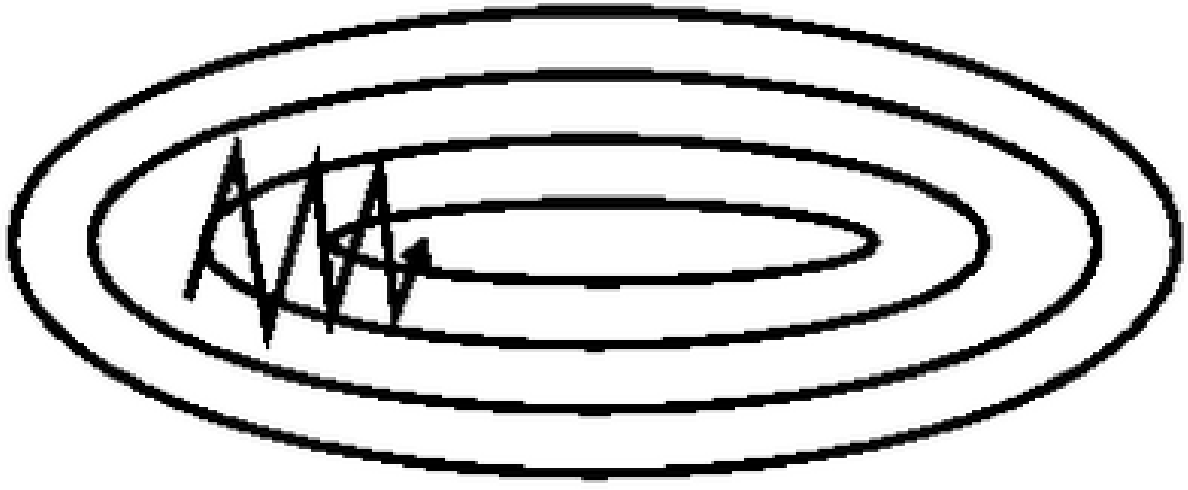
**Řešení:** Ke změně vah dané gradientním sestupem přičteme část změny v předchozím kroku, tedy definujeme

$$\Delta w_{ji}^{(t)} = \Delta \vec{w}^{(t)} + \alpha \cdot \Delta w_{ji}^{(t-1)}$$

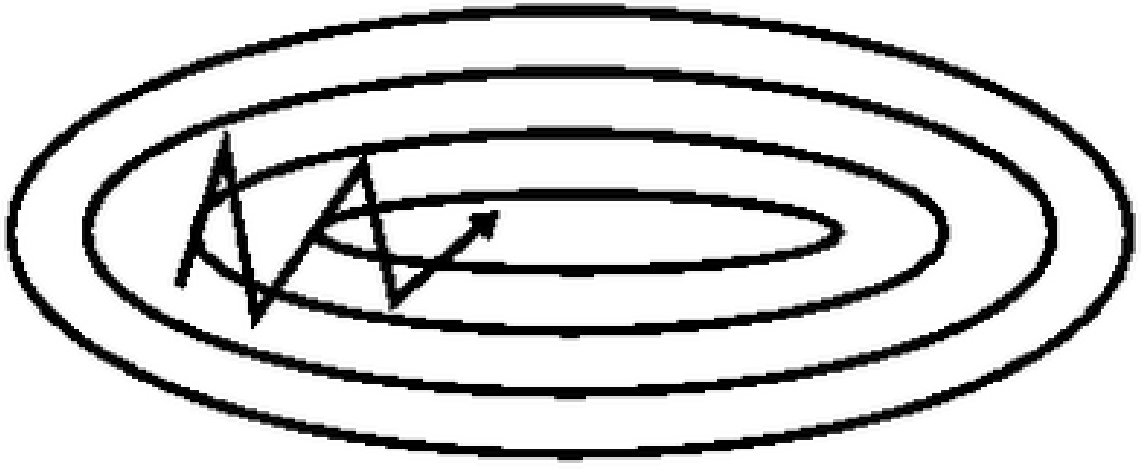
kde $0 < \alpha < 1$.

# Moment - ilustrace

Bez momentu:



S momentem:



# Volba aktivační funkce

Požadavky na vhodnou aktivační funkci $\sigma(\xi)$:

1. diferencovatelnost (jinak neuděláme gradientní sestup)
2. nelinearita (jinak by vícevrstvé sítě byly ekvivalentní jednovrstvým)
3. omezenost (váhy a potenciály budou také omezené $\Rightarrow$ konečnost učení)
4. monotónnost (lokální extrémy fce $\sigma$ zanáší nové lokální extrémy do chybové funkce)
5. linearita pro malé $\xi$ (umožní lineární model, pokud stačí k řešení úlohy)

Sigmoidální funkce splňují všechny požadavky.

Síť se sigmoidálními funkcemi obvykle reprezentuje data distribuovaně (tj. více neuronů vrací větší hodnotu pro daný vstup).

Později se seznámíme se sítěmi, jejichž aktivační funkce porušují některé požadavky (Gaussovy funkce) - používá se jiný typ učení.

# Volba aktivační funkce

- Z hlediska rychlosti konvergence je výhodné volit *lichou* aktivační funkci.
- Standardní sigmoida není lichá, vhodnější je použít hyperbolický tangens:

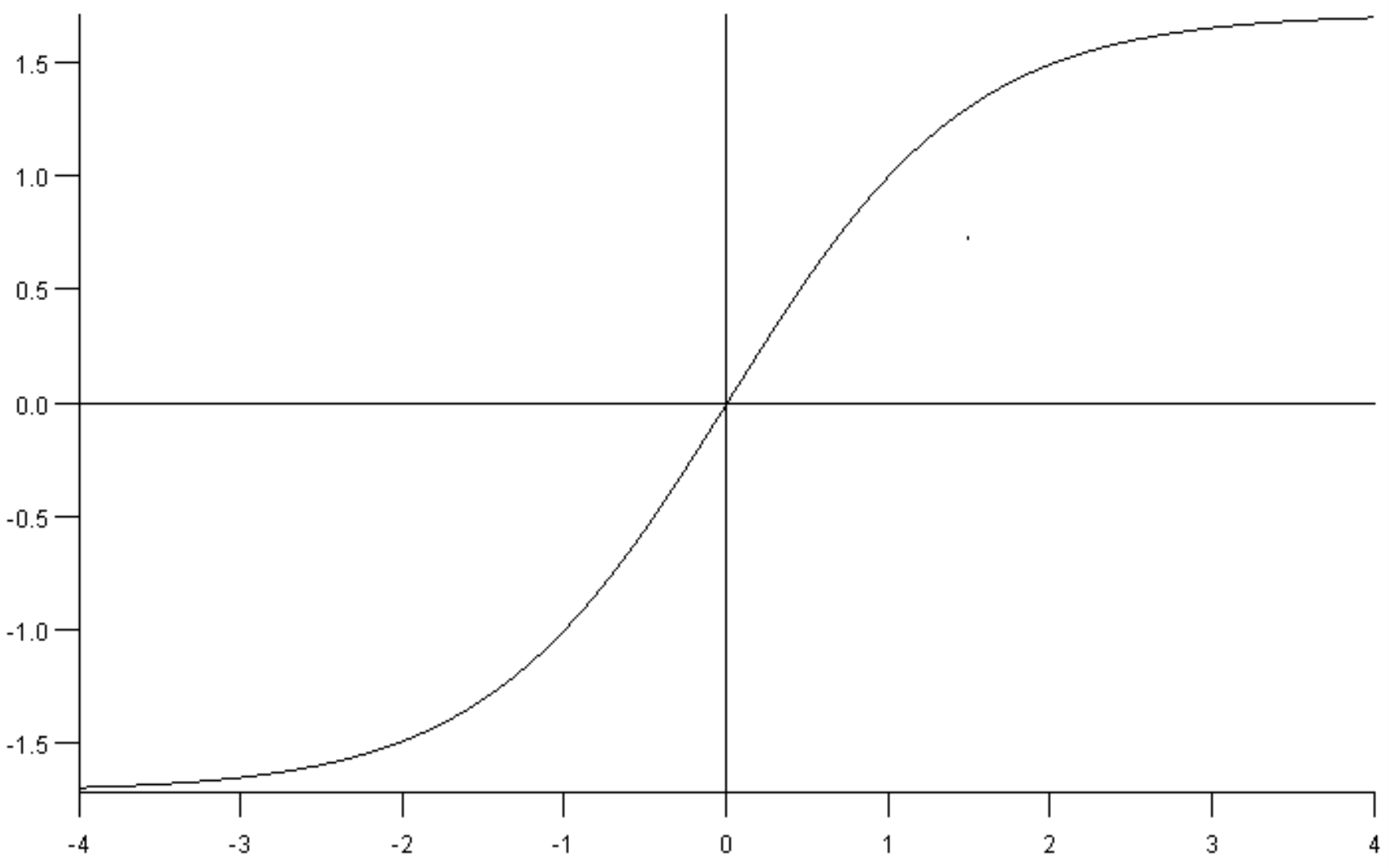
$$\sigma(\xi) = a \cdot \tanh(b \cdot \xi)$$

- Při optimalizaci lze předpokládat, že sigmoidální funkce jsou fixní a „hýbat“ pouze dalšími paramtery.
- Z technických důvodů *budeme dále předpokládat, že všechny aktivační funkce jsou tvaru*

$$\sigma_j(\xi_j) = a \cdot \tanh(b \cdot \xi_j)$$

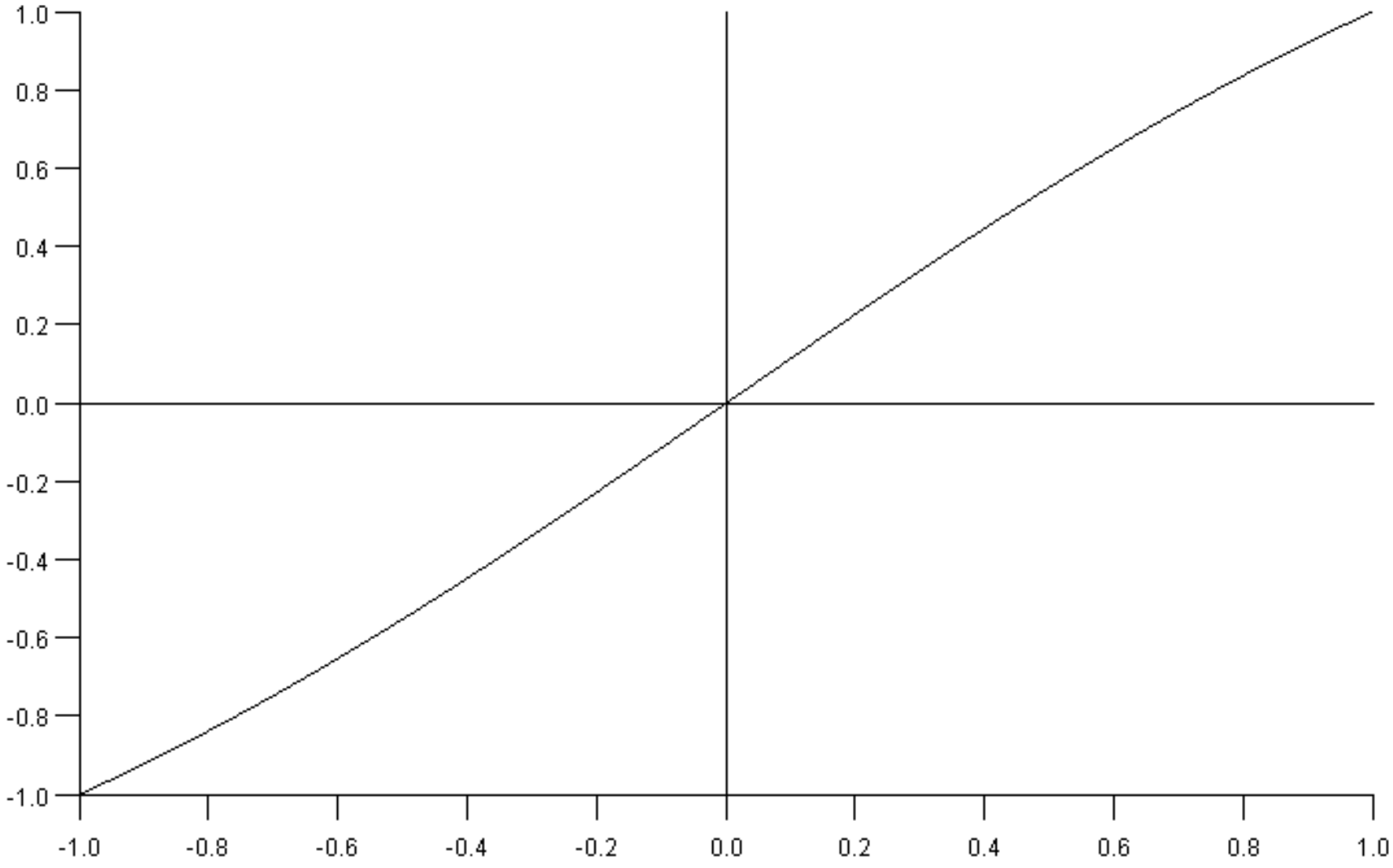
*kde* $a = 1.7159$ *a* $b = \frac{2}{3}$.

# Volba aktivační funkce



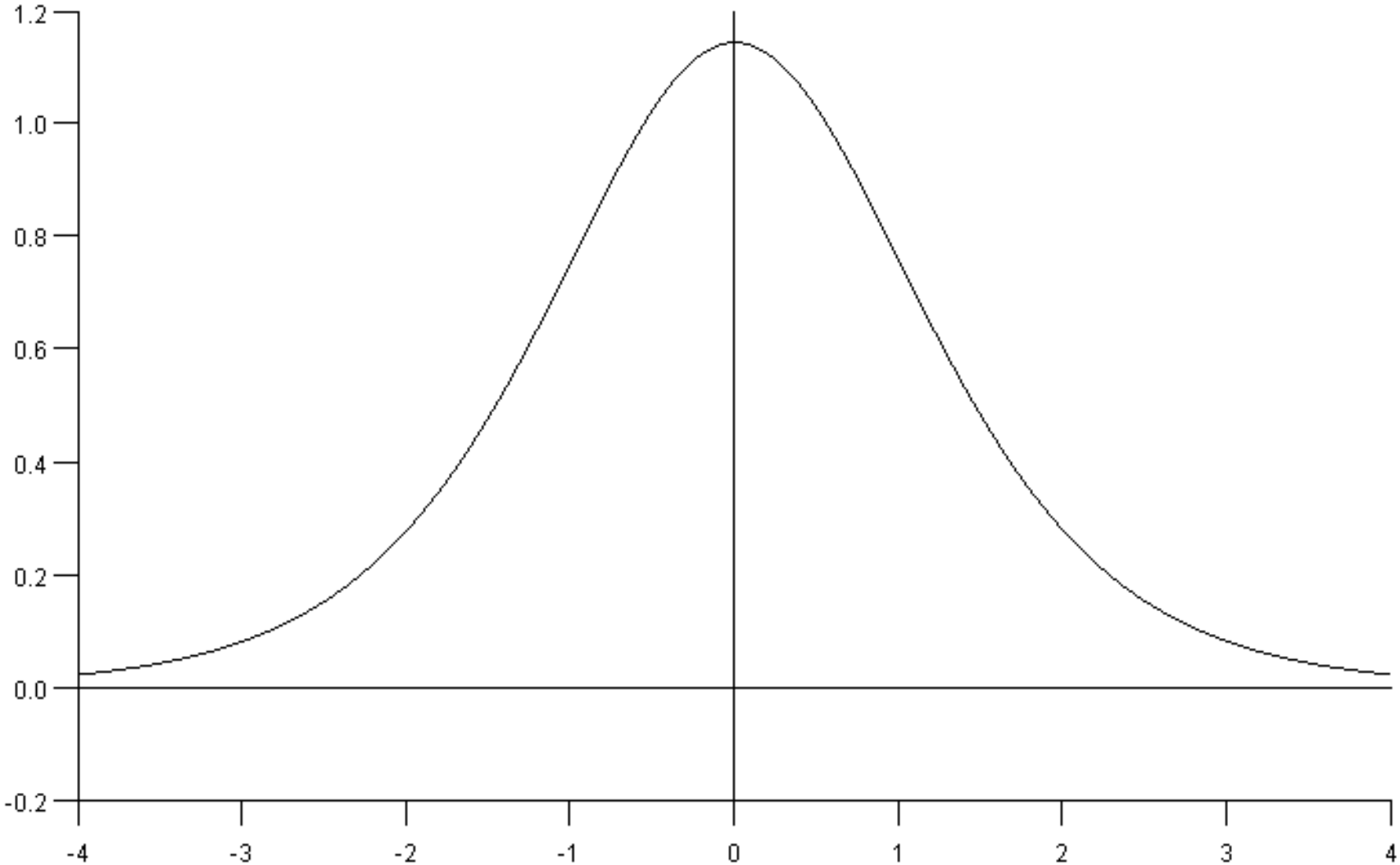

$\sigma(\xi) = 1.7159 \cdot \tanh(\frac{2}{3} \cdot \xi)$, platí $\lim_{\xi \to \infty} \sigma(\xi) = 1.7159$ a $\lim_{\xi \to -\infty} \sigma(\xi) = -1.7159$

# Volba aktivační funkce



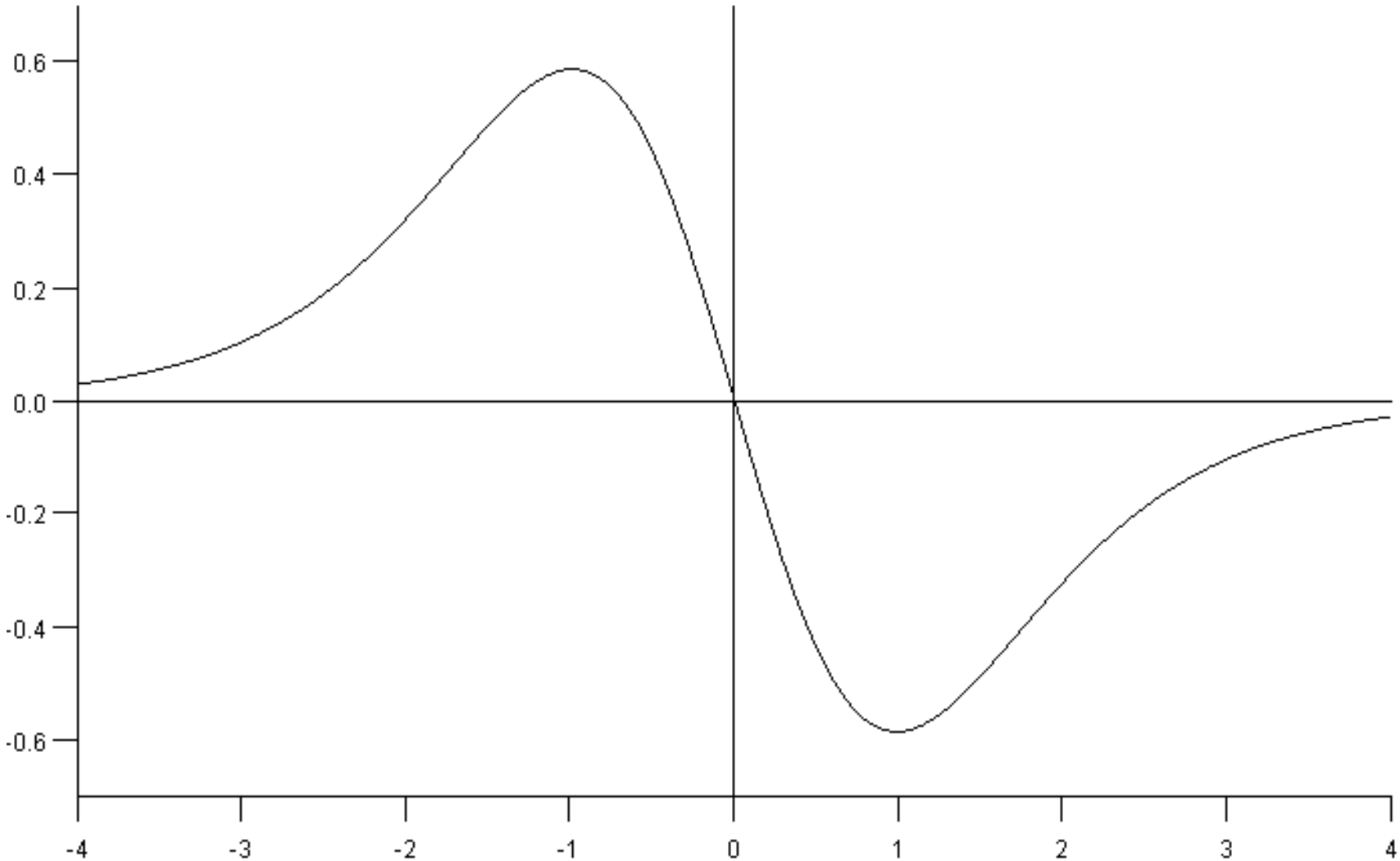

$\sigma(\xi) = 1.7159 \cdot \tanh(\frac{2}{3} \cdot \xi)$ je téměř lineární na $[-1, 1]$

# Volba aktivační funkce




první derivace funkce $\sigma(\xi) = 1.7159 \cdot \tanh(\frac{2}{3} \cdot \xi)$

# Volba aktivační funkce




druhá derivace funkce $\sigma(\xi) = 1.7159 \cdot \tanh(\frac{2}{3} \cdot \xi)$

# Předzpracování vstupů

- Některé vstupy mohou být mnohem větší než jiné

  Př.: Výška člověka vs délka chodidla (oboje v cm), maximální rychlost auta (v km/h) vs cena (v Kč), apod.

- Velké komponenty vstupů ovlivňují učení více, než ty malé. Navíc příliš velké vstupy mohou zpomalit učení.
- Numerická data se obvykle normalizují tak, že mají
  - průměrnou hodnotu $= 0$ (normalizace odečtením průměru)
  - rozptyl $= 1$ (normalizace podělením směrodatnou odchylkou)

  Zde průměr a směrodatná odchylka mohou být odhadnuty z náhodného vzorku (např. z tréninkové množiny).
- Jednotlivé komponenty vstupu by měly mít co nejmenší korelaci (tj. vzájemnou závislost).

  (Metody pro odstranění korelace dat jsou např. analýza hlavních komponent (Principal Component Analysis, PCA). Lze ji implementovat i pomocí neuronových sítí (probereme později)).

# Iniciální volba vah

- Iniciálně jsou váhy nastaveny náhodně z daného intervalu $[-w, w]$ kde $w$ závisí na počtu vstupů daného neuronu. Jaké je vhodné $w$?
- Uvažujeme aktivační funkci $1.7159 \cdot \tanh(\frac{2}{3} \cdot \xi)$ pro všechny neurony.
  - na intervalu $[-1, 1]$ se $\sigma$ chová téměř lineárně,
  - extrémy $\sigma''$ jsou přibližně v bodech $-1$ a $1$,
  - mimo interval $[-4, 4]$ je $\sigma$ blízko extrémních hodnot.

  Tedy
  - Pro velmi malé $w$ hrozí, že obdržíme téměř lineární model (to bychom mohli dostat s použitím jednovrstvé sítě). Navíc chybová funkce je velmi plochá v blízkosti $\vec{0}$ (malý gradient).
  - Pro $w$ mnohem větší než 1 hrozí, že vnitřní potenciály budou vždy příliš velké a síť se nebude učit (gradient chyby $E$ bude velmi malý, protože hodnota sítě se téměř nezmění se změnou vah).

  Chceme tedy zvolit $w$ tak, aby vnitřní potenciály byly zhruba z intervalu $[-1, 1]$.

# Iniciální volba vah

- Data mají po normalizaci (zhruba) nulovou střední hodnotu, rozptyl (zhruba) 1 a předpokládejme, že jednotlivé komponenty vstupů jsou (téměř) nekorelované.
- Uvažme neuron $j$ z první vrstvy s $d$ vstupy, předpokládejme, že jeho váhy jsou voleny uniformně z intervalu $[-w, w]$.
- **Pravidlo:** $w$ je dobré volit tak, že *směrodatná odchylka* vnitřního potenciálu $\xi_j$ (označme ji $o_j$) leží na hranici intervalu, na němž je aktivační funkce $\sigma_j$ téměř lineární tj. v našem případě chceme $o_j \approx 1$.
- Z našich předpokladů plyne $o_j = \sqrt{\frac{d}{3}} \cdot w$.

  tj. v našem případě položíme $w = \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{d}}$.
- Totéž funguje pro vyšší vrstvy, $d$ potom odpovídá počtu neuronů ve vrstvě o jedna nižší.

  (Zde je důležité, že je aktivační funkce lichá)

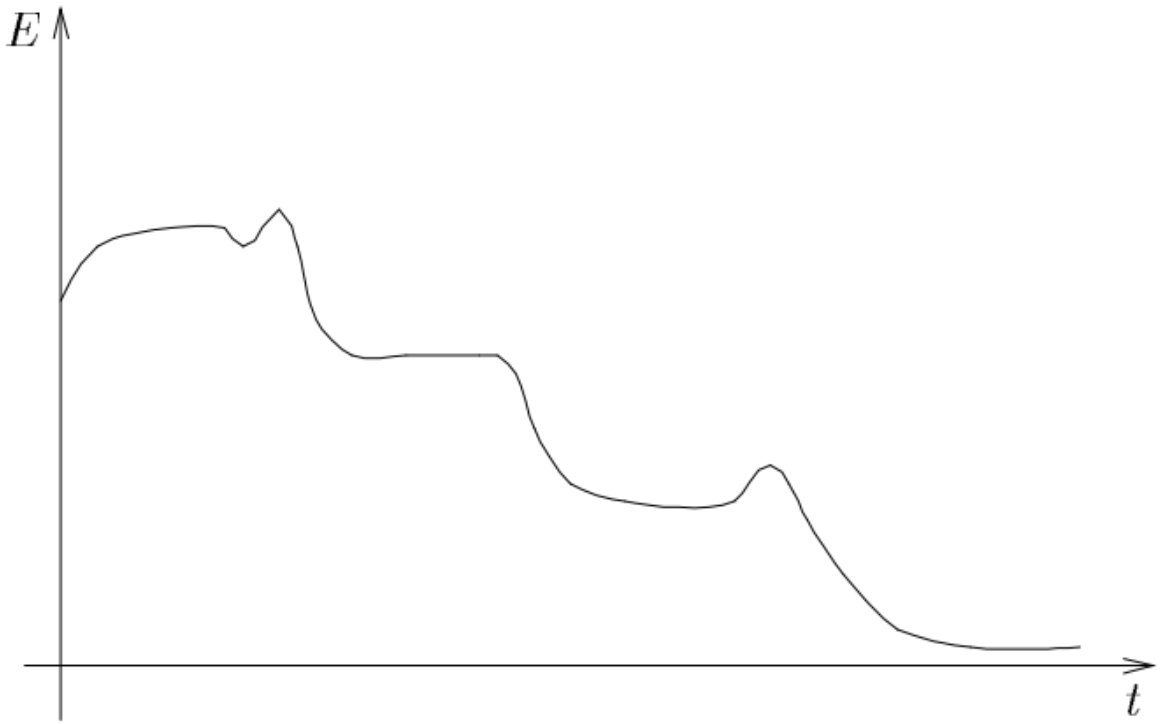
# Požadované hodnoty

- Požadované hodnoty $d_{kj}$ by měly být voleny v oboru hodnot aktivačních funkcí, což je v našem případě $[-1.716, 1.716]$.
- Požadované hodnoty příliš blízko extrémům $\pm 1.716$ způsobí, že váhy neomezeně porostou, vnitřní neurony budou mít velké potenciály, gradient chybové funkce bude malý a učení se zpomalí.
- Proto je vhodné volit požadované hodnoty z intervalu $[-1.716 + \delta, 1.716 - \delta]$. Optimální je, když tento interval odpovídá maximálnímu intervalu na němž jsou aktivační fce lineární. Tedy v našem případě $\delta \approx 0.716$, tj. hodnoty $d_{kj}$ je dobré brát z intervalu $[-1, 1]$.

# Rychlost učení

Obecné zásady pro volbu a změny rychlosti učení $\varepsilon$

- Je dobré začít s malou rychlostí (např. $\varepsilon = 0.1$).
- Pokud se chyba znatelně zmenšuje (učení konverguje), můžeme rychlost nepatrně zvýšit.
- Pokud se chyba zjevně zvětšuje (učení diverguje), můžeme rychlost snížit.
- Krátkodobé zvýšení chyby nemusí nutně znamenat divergenci.




Obr. 2.3: Typický vývoj chyby v čase při učení pomocí backpropagation.

# Rychlost učení

Chceme, aby se neurony učily pokud možno stejně rychle. Více vstupů obvykle znamená rychlejší učení.

Pro každou váhu $w_{ji}$ můžeme mít zvláštní rychlost učení $\varepsilon_{ji}$

- $\varepsilon_{ji}$ lze iniciovat např. $1/|j_{\leftarrow}|$, kde $|j_{\leftarrow}|$ je počet vstupů neuronu $j$.
- Po zahájení učení váhu zvolna zvyšujeme

  (třeba $\varepsilon_{ji}(t) = K\varepsilon_{ji}(t-1)$ kde $K > 1$)
- Jakmile se změní znaménko $\Delta w_{ji}^{(t)}$ (tedy $\Delta w_{ji}^{(t-1)} \cdot \Delta w_{ji}^{(t)} < 0$), váhu snížíme

  (třeba takto $\varepsilon_{ji}(t) = \frac{1}{2}\varepsilon_{ji}(t-1)$)

# Rychlost a směr - přesněji

Na gradientní sestup se můžeme dívat obecněji takto:

$$\Delta\vec{w}^{(t)} = r(t) \cdot s(t)$$

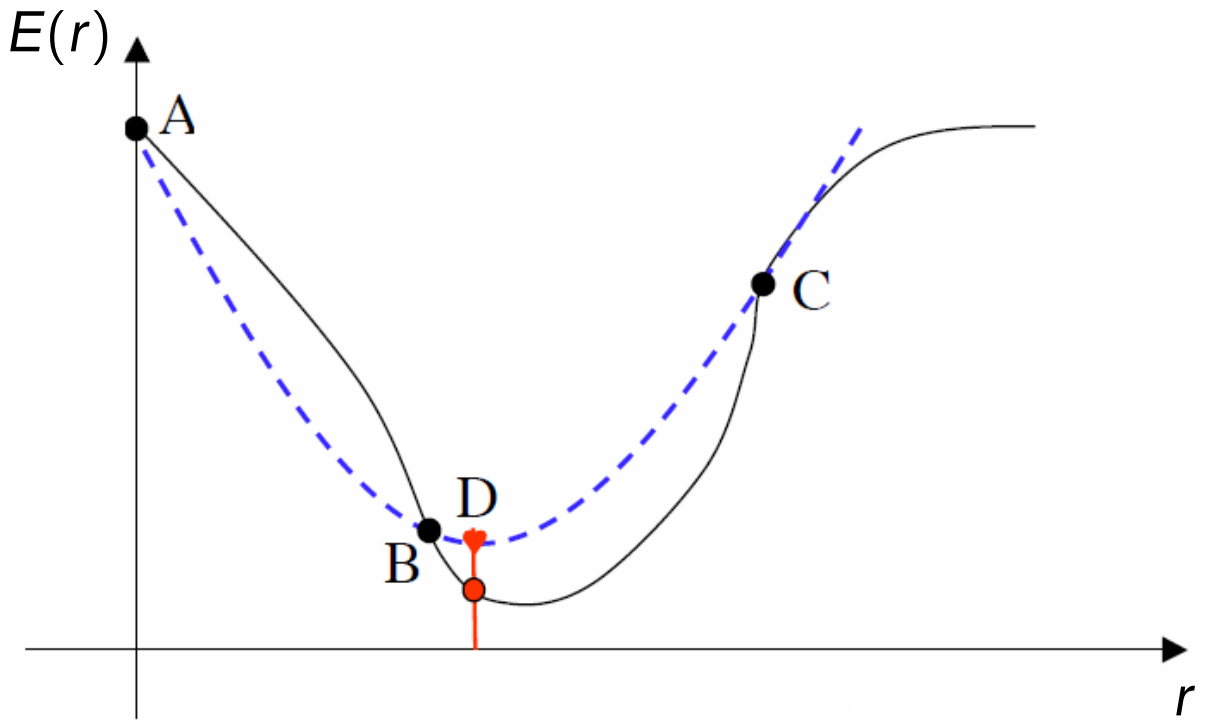
kde $r(t)$ je rychlost změny vah a $s(t)$ je směr změny vah.
V našem případě: $r(t) = \varepsilon(t)$ a $s(t) = -\nabla E(\vec{w}^{(t-1)})$
(nebo $s(t) = -\nabla E_k(\vec{w}^{(t-1)})$ pro online učení).

- Ideální by bylo volit $r(t)$ tak, abychom minimalizovali $E(\vec{w}^{(t-1)} + r(t) \cdot s(t))$.

  Nebo se aspoň chceme přesunout (ve směru $s(t)$) do místa, v němž začne gradient opět růst.
- Toho lze (přibližně) dosáhnout malými přesuny bez změny směru - nedostaneme ovšem o mnoho lepší algoritmus než standardní grad. sestup (který stále mění směr).
- Existují lepší metody, např. **parabolická interpolace** chybové funkce.

# Rychlost a směr - parabolická interpolace

Označme $E(r) = E(\vec{w}^{(t-1)} + r \cdot s(t))$; minimalizujeme $E(r)$.

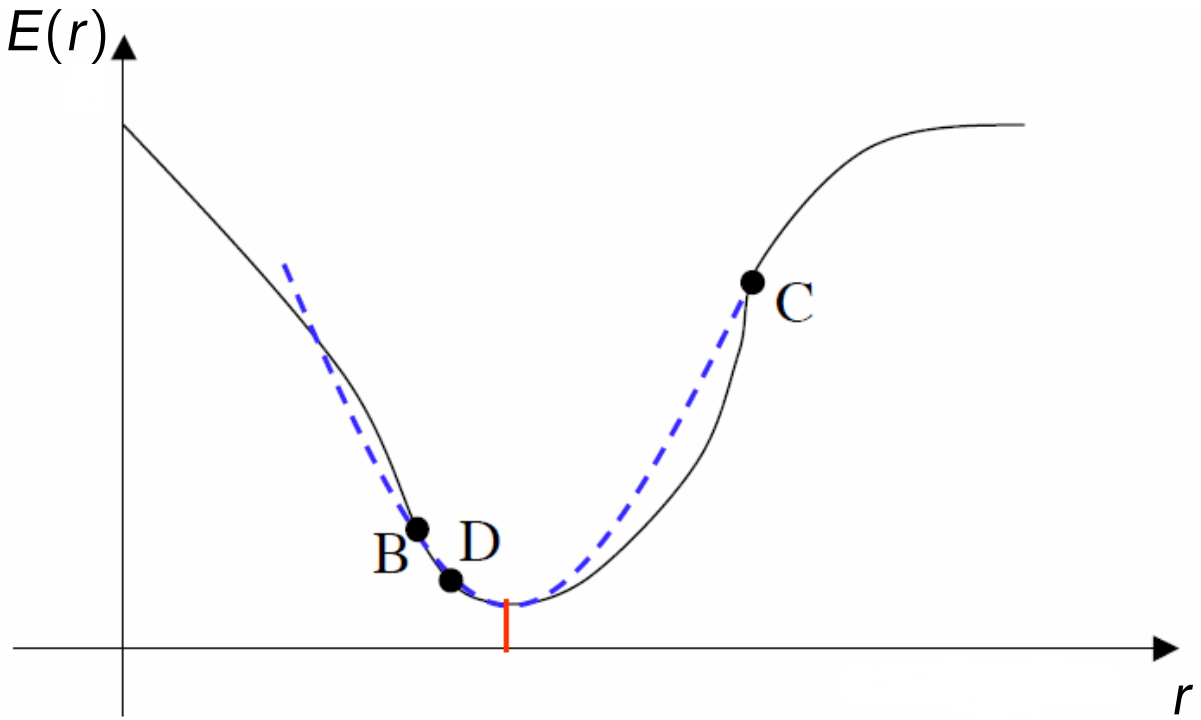



Předpokládejme, že jsme schopni nalézt body $A, B, C$ takové, že $E(A) > E(B)$ a $E(C) > E(B)$. Pak lze tyto body proložit parabolou a nalézt její minimum $D$. Toto $D$ je dobrým odhadem minima $E(r)$.

Obrázek: Neural Computation, Dr John A. Bullinaria

# Rychlost a směr - parabolická interpolace

Parabolickou interpolaci lze dále iterovat, čímž dosáhneme ještě lepšího odhadu:




Je jasné, že $E(B) \geq E(D)$ a $E(C) > E(D)$. Pokud $E(B) > E(D)$, lze použít stejný postup jako předtím
(jinak je nutné nalézt nový bod $B'$ t. ž. $E(B') > E(D)$).

# Optimální směr

Zbývá otázka, jestli je záporný gradient správným směrem.

Rychlost $r(t)$ jsme volili tak, abychom minimalizovali

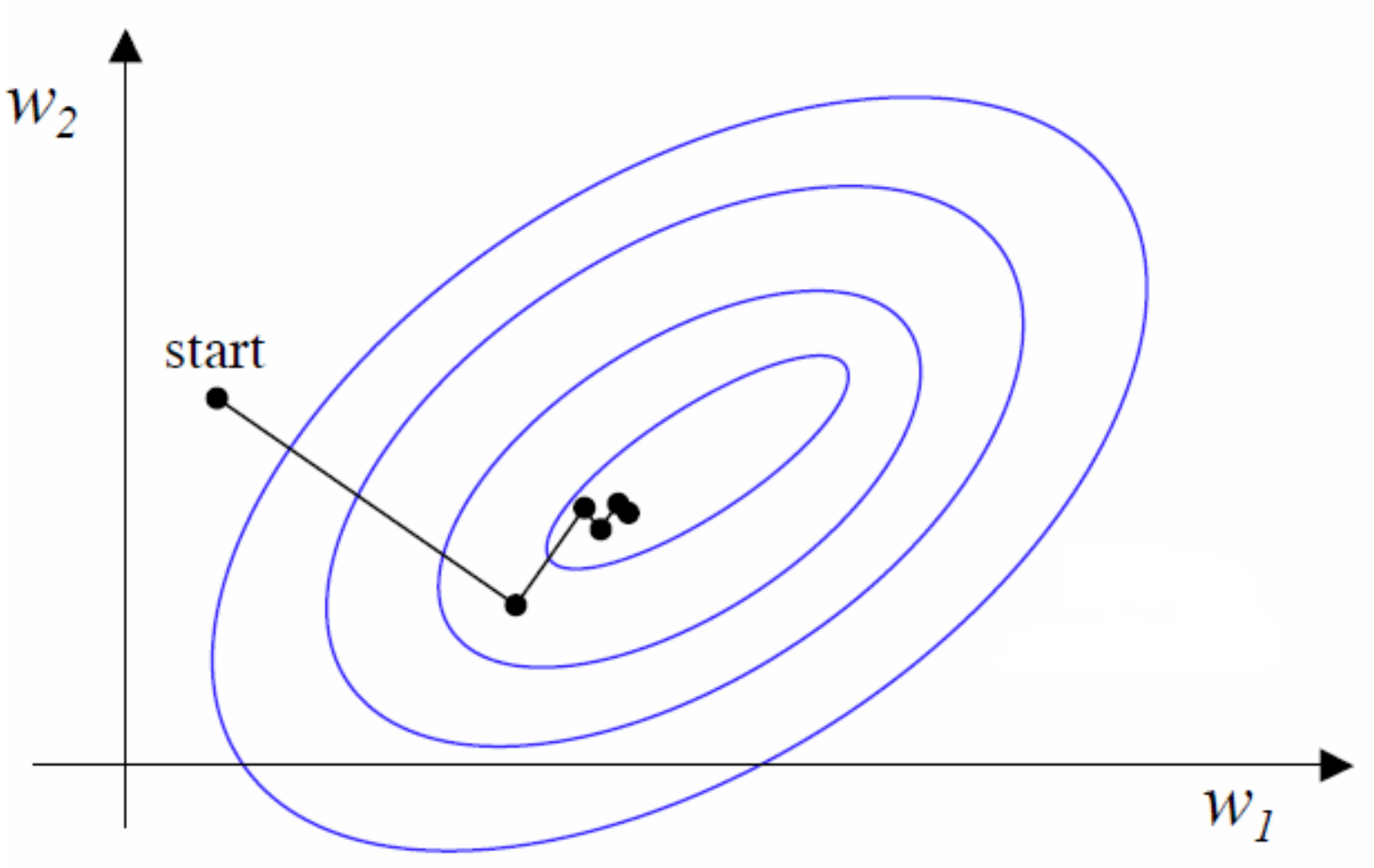
$$\begin{aligned} E(\vec{w}^{(t)}) &= E\left(\vec{w}^{(t-1)} + r(t) \cdot s(t)\right) \\ &= E\left(\vec{w}^{(t-1)} + r(t) \cdot (-\nabla E(\vec{w}^{(t-1)})\right) \end{aligned}$$

To ovšem znamená, že derivace $E(\vec{w}^{(t)})$ podle $r(t)$ (zde bereme $r(t)$ jako nezávislou proměnnou) bude 0, tedy

$$\begin{aligned} \frac{\delta E}{\delta r}(\vec{w}^{(t)}) &= \sum_{j,i} \frac{\delta E}{\delta w_{ji}}(\vec{w}^{(t)}) \cdot \left(-\frac{\delta E}{\delta w_{ji}}(\vec{w}^{(t-1)})\right) \\ &= \nabla E(\vec{w}^{(t)}) \cdot (-\nabla E(\vec{w}^{(t-1)})) \\ &= 0 \end{aligned}$$

Tj. nový a starý směr jsou vzájemně kolmé, výpočet tedy „kličkuje“.

# Gradientní sestup s optimální rychlostí




Obrázek: Neural Computation, Dr John A. Bullinaria

# Rychlost a směr - přesněji

**Řešení:** Do nového směru zahrneme částečně i předchozí směr a tím zmenšíme kličkování.

$$s(t) = -\nabla E(\vec{w}^{(t-1)}) + \beta \cdot s(t-1)$$

Jak určit $\beta$ ? Metoda **sdružených gradientů** je založena na tom, že nový směr by měl co nejméně kazit minimalizaci dosaženou v předchozím směru. Chceme nalézt nový směr $s(t)$ takový, že gradient funkce funkce $E$ v novém bodě $\vec{w}^{(t)} = \vec{w}^{(t-1)} + r(t) \cdot s(t)$ ve starém směru $s(t-1)$ je nulový:

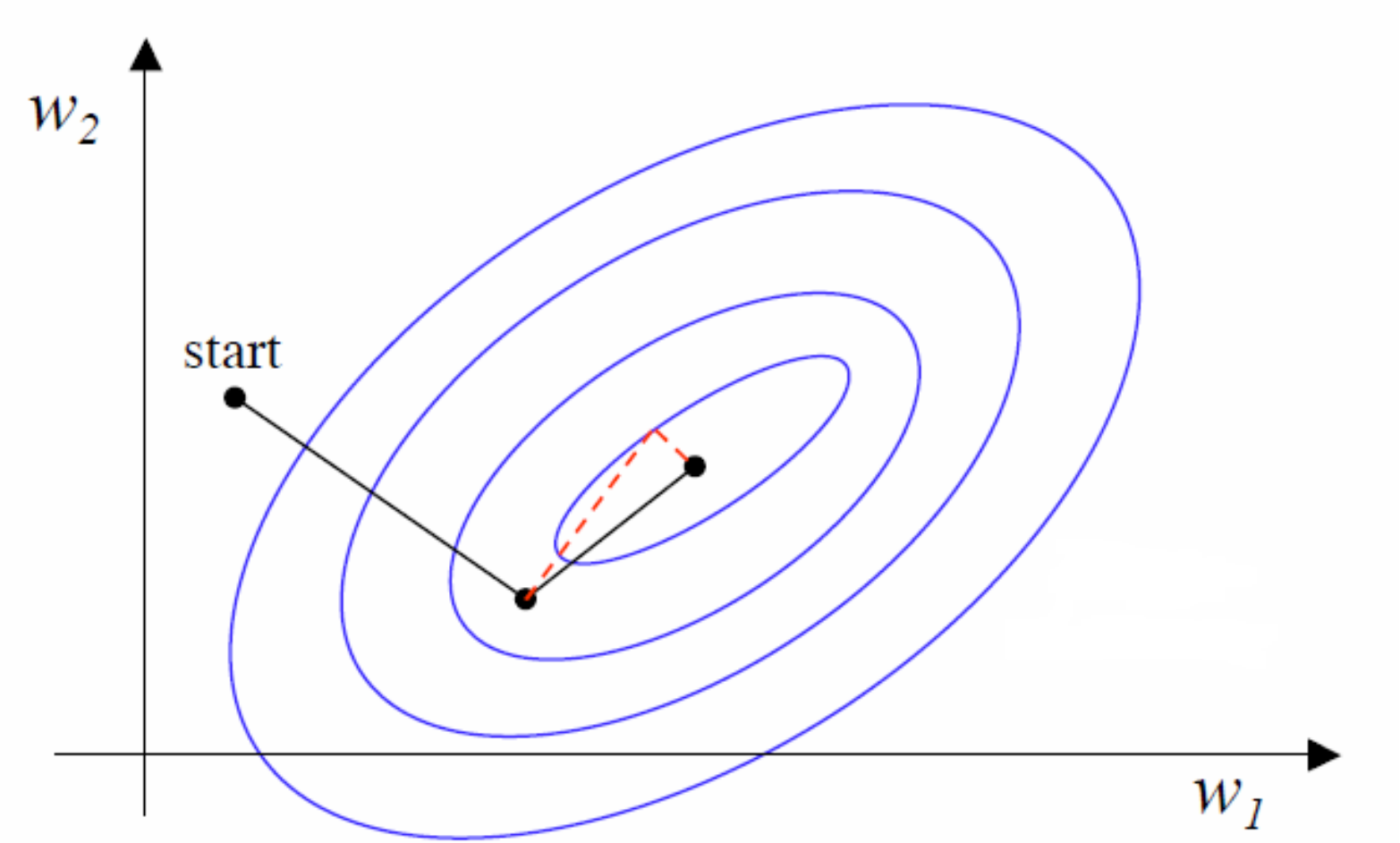
$$s(t-1) \cdot \nabla E(\vec{w}^{(t)}) = 0$$

Vhodné $\beta$, které to splňuje je dáno následujícím pravidlem (Polak-Ribiere):

$$\beta = \frac{(\nabla E(\vec{w}^{(t)}) - \nabla E(\vec{w}^{(t-1)})) \cdot \nabla E(\vec{w}^{(t)})}{\nabla E(\vec{w}^{(t-1)}) \cdot \nabla E(\vec{w}^{(t-1)})}$$

(Pokud by $E$ byla kvadratická funkce, pak to konverguje v nejvýše $n$ krocích)

# Gradientní sestup s optimální rychlostí




Obrázek: Neural Computation, Dr John A. Bullinaria

# Další metody

Existuje mnoho metod druhého řádu, které jsou přesnější, ale obvykle výpočetně mnohem náročnější (příliš se nepoužívají). Např. Newtonova metoda, Levenberg-Marquardt, atd.

Většina těchto metod vyžaduje výpočet (nebo aspoň aproximaci) druhé derivace chybové funkce nebo funkce sítě (tj. Hessián).

Lze nalézt v literatuře, např.
Haykin, Neural Neworks and Learning Machines

# Schopnost generalizace

V klasifikačních problémech se dá generalizace popsat jako schopnost vyrovnat se s novými vzory.

Pokud síť trénujeme na náhodně vybraných datech, není ideální přesně klasifikovat tréninkové vzory.

Pokud aproximujeme funkční závislost vstupů a očekávaných výstupů pak obvykle nechceme aby funkce sítě vracela přesné hodnoty pro tréninkové vzory.

Exaktněji: Obvykle se předpokládá, že tréninková množina byla generována takto:

$$d_{kj} = g_j(\vec{x}_k) + \Theta_{kj}$$

kde $g_j$ je „správná“ funkce výstupního neuronu $j \in Y$ a $\Theta_{kj}$ je náhodný šum. Chceme, aby síť pokud možno realizovala funkce $g_j$.

# Kdy zastavit učení?

Standardní kritérium: Chyba $E$ je dostatečně malá.

Další možnost: po několik iterací je gradient chyby malý.

(Výhodou tohoto kritéria je, že se nemusí počítat chyba $E$)

**Problém:** Příliš dlouhé učení způsobí, že síť „opisuje“ tréninkové vzory (je přetrénovaná). Důsledkem je špatná generalizace.

**Řešení:** Množinu vzorů rozdělíme do následujících množin

- **tréninková** (např. 60%) - podle těchto vzorů se síť učí
- **validační** (např. 20%) - používá se k zastavení učení.
- **testovací** (např. 20%) - používá se po skončení učení k testování přesnosti sítě, tedy srovnání několika natrénovaných sítí.

# Trénink, testování, validace

Obvykle se realizuje několik iterací (cca 5) tréninku na tréninkové množině. Poté se vyhodnotí chyba $E$ na validační množině.

Ideálně chceme zastavit v minimu chyby na validační množině. V praxi se sleduje, zda chyba na validační množině klesá. Jakmile začne růst (nebo roste po několik iterací za sebou), učení zastavíme.

**Problém:** Co když máme příliš málo vzorů?

Můžeme tréninkovou množinu rozdělit na $K$ skupin $S_1, \ldots, S_K$. Trénujeme v $K$ fázích, v $\ell$-té fázi provedeme následující:

- trénujeme na $S_1 \cup \ldots \cup S_{\ell-1} \cup S_{\ell+1} \cup \ldots \cup S_K$
- spočteme chybu $e_\ell$ funkce $E$ na skupině $S_\ell$

Celková chyba je potom průměr $e = \frac{1}{K} \sum_{\ell=1}^{K} e_\ell$.

Extrémní verze: $K =$ počet vzorů (používá se při extrémně málo vzorech)

# Velikost sítě

Podobný problém jako v případě délky učení:

- Příliš malá síť není schopna dostatečně zachytit tréninkovou množinu a bude mít stále velkou chybu
- Příliš velká síť má tendenci přesně opsat tréninkové vzory - špatná generalizace

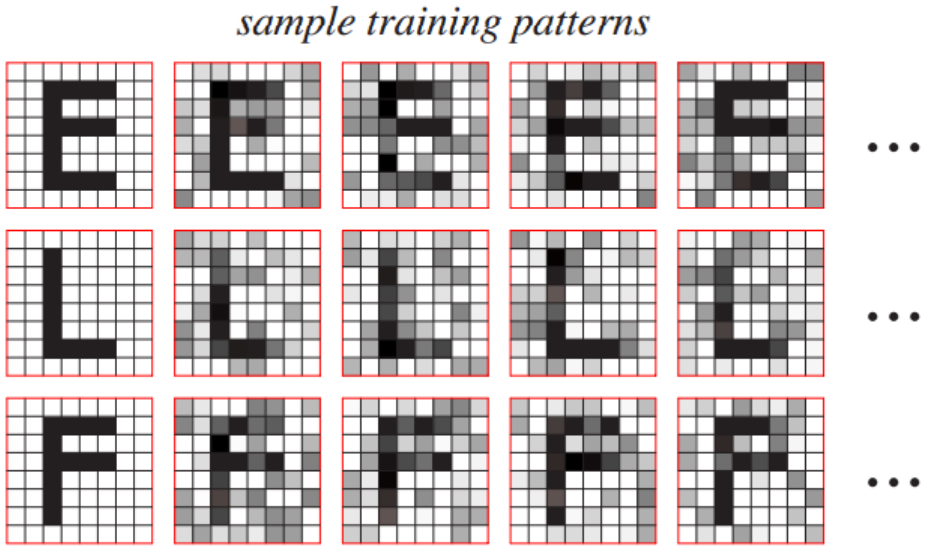
**Řešení:** Optimální počet neuronů :-)

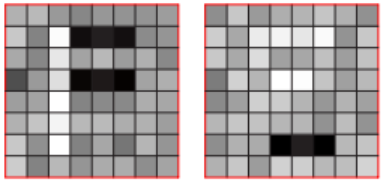
- teoretické výsledky existují, ale jsou většinou nepoužitelné
- existují učící algoritmy, které postupně přidávají neurony (konstruktivní algoritmy) nebo odstraňují spoje a neurony (prořezávání)
- V praxi se počet vrstev a neuronů stanovuje experimentálně (prostě se to zkusí, uvidí, opraví) a/nebo na základě zkušeností.

# Velikost sítě

Uvažme dvouvrstvou síť. Neurony ve vnitřní vrtvě často reprezentují "vzory" ve vstupní množině.

Př.: Síť 64-2-3 pro klasifikaci písmen:



*learned input-to-hidden weights*

# Velikost tréninkové množiny

Příliš malá nebo nereprezentativní tréninková množina vede ke špatné generalizaci

Příliš velká zvyšuje složitost učení. V případě dávkového algoritmu způsobuje velkou chybu (chyby na vzorech se sčítají), což může vést k přetrénování.

**Pravidlo pro klasifikační úlohy:** počet vzorů by měl zhruba odpovídat $W/\delta$ kde

- $W$ je počet vah v síti
- $0 < \delta < 1$ je tolerovaná chyba na testovací množině
  (tj. tolerujeme $\delta$ chybně klasifikovaných vzorů z testovací množiny)

# Regularizace - upadání vah (weight decay)

Generalizaci lze zlepšit tak, že v síti necháme jen „nutné“ neurony a spoje. Možná heuristika spočívá v odstranění malých vah. Penalizací velkých vah dostaneme silnější indikaci důležitosti vah.

V každém kroku učení zmenšíme uměle všechny váhy

$$w_{ji}^{(m)} = (1 - \zeta)(w_{ji}^{(m-1)} + \Delta w_{ji}^{(m)})$$

Idea: Nedůležité váhy budou velmi rychle klesat k 0 (potom je můžeme vyhodit). Důležité váhy dokážou „přetlačit“ klesání a zůstanou dostatečně velké.

Toto je ekvivalentní gradientnímu sestupu s konstantní rychlostí učení $\varepsilon$, pokud chybovou funkci modifikujeme takto:

$$E'(\vec{w}) = E(\vec{w}) + \frac{2\zeta}{\varepsilon}(\vec{w} \cdot \vec{w})$$

Zde **regularizační člen** $\frac{2\zeta}{\varepsilon}(\vec{w} \cdot \vec{w})$ penalizuje velké váhy.

# Praxe - Matice zmatenosti

Confusion matrix

Síť má za úkol klasifikovat objekty do $K$ tříd $T_1, \ldots, T_K$. Confusion matrix je tabulka, jejíž pole v $i$-tém řádku a $j$-tém sloupci obsahuje počet objektů z třídy $T_i$, které byly klasifikovány jako objekty z třídy $T_j$.

Example confusion matrix

| | | **Predicted** | | |
|---|---|---|---|---|
| | | **Cat** | **Dog** | **Rabbit** |
| **Actual** | **Cat** | 5 | 3 | 0 |
| | **Dog** | 2 | 3 | 1 |
| | **Rabbit** | 0 | 2 | 11 |

Zdroj: http://en.wikipedia.org/wiki/Confusion_matrix