Asociativní sítě

Cílem je uchovat množinu vzorů $\{(\vec{x}_k, \vec{d}_k) \mid k = 1, \ldots, p\}$ tak, aby platilo následující:

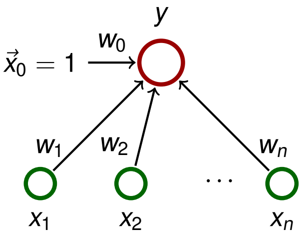
Po předložení nového vstupu $\vec{x}$, který je „blízko" některému $\vec{x}_k$ bude výstup sítě roven (nebo alespoň blízko) $\vec{d}_k$.

Zejména by síť měla mít schopnost *reprodukce*:
Pro vstup $\vec{x}_k$ by měla dát výstup $\vec{d}_k$.

Lineární asociativní síť (alias ADALINE s Hebbovým učením)

(Pro jednoduchost a srovnání s ADALINE uvážíme pouze jeden výstup)

Organizační dynamika LAS:



$\vec{w} = (w_0, w_1, \ldots, w_n)$ a $\vec{x} = (x_0, x_1, \ldots, x_n)$ kde $x_0 = 1$.

Aktivní dynamika:

funkce sítě: $y[\vec{w}](\vec{x}) = \vec{w} \cdot \vec{x} = \sum_{i=0}^{n} w_i x_i$

Hebbovo učení

Adaptivní dynamika:

Dána množina **tréninkových vzorů**

$$\mathcal{T} = \left\{\left(\vec{x}_1, d_1\right), \left(\vec{x}_2, d_2\right), \ldots, \left(\vec{x}_p, d_p\right)\right\}$$

Zde $\vec{x}_k = (x_{k0}, x_{k1} \ldots, x_{kn})^\top \in \mathbb{R}^{n+1}$, $x_{k0} = 1$, je vstup k-tého vzoru a $d_k \in \mathbb{R}$ je očekávaný výstup.

Intuice: chceme, aby síť počítala afinní aproximaci funkce, jejíž (některé) hodnoty nám předepisuje tréninková množina.

Hebbovo učení

Hebbův zákon: *When an axon of a cell A is near enough to excite a cell B and repeatedly or persistently takes part in firing it, some growth process or metabolic change takes place in one or both cells such that A's efficiency, as one of the cells firing B, is increased.*

Zákon formuloval neuropsycholog Donald Hebb v knize „the organization of Behavior“ z roku 1949.

Jinými slovy: *Cells that fire together, wire together.*

Formulace používaná v umělých NS:
Změna váhy spoje mezi dvěma neurony je úměrná jejich souhlasné aktivitě.

Hebb se snažil vysvětlit podmíněné reflexy: Současná aktivita/pasivita presynaptického neuronu (příčina) a postsynaptického neuronu (reakce) posiluje/zeslabuje synaptickou vazbu.

Hebbovo učení LAS

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

- $\vec{w}_i^{(0)} = 0$ pro $0 \leq i \leq n$,
- v kroku k (zde $k = 1, 2, \ldots$) je síti předložen vzor $(\vec{x}_k, d_k)$ a váhy se adaptují podle Hebbova zákona:

$$\vec{w}^{(k)} = \vec{w}^{(k-1)} + \vec{x}_k d_k$$

Výsledný vektor:

$$\vec{w} = \vec{w}^{(p)} = \sum_{k=1}^{p} \vec{x}_k d_k = X^\top \vec{d}$$

kde X je matice, která má v *i-tém řádku* vektor $\vec{x}_i^\top$ a $\vec{d} = (d_1, \ldots, d_p)^\top$

LAS a ortonormální vstupy

Pokud jsou $\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_p$ ortonormální, tedy

$$\vec{x}_i^\top \vec{x}_j = \begin{cases} 0 & i \neq j \\ 1 & i = j \end{cases}$$

pak LAS má schopnost **reprodukce**:

$$\vec{w}^\top \vec{x}_i = \sum_{k=1}^{p} (\vec{x}_k d_k)^\top \vec{x}_i = \sum_{k=1}^{p} d_k (\vec{x}_k^\top \vec{x}_i) = d_i$$

LAS a ortonormální vstupy

... a **asociace**:

Uvažme vstup: $\vec{x}_r + \vec{u}$ kde norma $\left\|\vec{u}\right\|$ je malá.

Chyba sítě pro r-tý vzor perturbovaný vektorem $\vec{u}$:

$$E_r := |\vec{w}^\top(\vec{x}_r + \vec{u}) - d_r| = |\vec{w}^\top \vec{x}_r + \vec{w}^\top \vec{u} - d_r| = |\vec{w}^\top \vec{u}|$$

Pokud $\vec{d}_r \in \{-1, 1\}$, pak

$$E_r = |\vec{w}^\top \vec{u}| = \left|\left(\sum_{k=1}^{p} \vec{x}_k d_k\right)^\top \vec{u}\right| = \left|\sum_{k=1}^{p} d_k(\vec{x}_k^\top \vec{u})\right|$$

$$\leq \sum_{k=1}^{p} |d_k(\vec{x}_k^\top \vec{u})| \leq \sum_{k=1}^{p} |d_k| \left\|\vec{x}_k\right\| \left\|\vec{u}\right\| \leq n \left\|\vec{u}\right\|$$

(Zde první nerovnost plyne z trojúhelníkové nerovnosti, druhá z Cauchyho-Schwarzovy nerovnosti a poslední z $p \leq n$, protože mohutnost množiny ortonormálních vektorů v $\mathbb{R}^n$ nemůže být větší než n.)

Tedy pro vstupy blízké vzorům odpovídá přibližně požadovaným výstupem

Hopfieldova síť

- Definice
- Energetická funkce
- Reprodukce
- Asociace

Hopfieldova síť

Autoasociativní síť.

Organizační dynamika:

- úplná topologie, tj. každý neuron je spojen s každým
- všechny neurony jsou současně vstupní i výstupní
- označme $\xi_1, \ldots, \xi_n$ vnitřní potenciály a $y_1, \ldots, y_n$ výstupy (stavy) jednotlivých neuronů
- označme w_{ji} *celočíselnou* váhu spoje od neuronu $i \in \{1, \ldots, n\}$ k neuronu $j \in \{1, \ldots, n\}$
- **Zatím:** žádný neuron nemá bias a přepokládáme $w_{jj} = 0$ pro každé $j = 1, \ldots, n$

Hopfieldova síť

Adaptivní dynamika: Dána tréninková množina

$$\mathcal{T} = \{\vec{x}_k \mid \vec{x}_k = (x_{k1}, \ldots, x_{kn}) \in \{-1, 1\}^n, k = 1, \ldots, p\}$$

Adaptace probíhá podle Hebbova zákona (podobně jako u LAS). Výsledná konfigurace je

$$w_{ji} = \sum_{k=1}^{p} x_{kj} x_{ki} \qquad 1 \leq j \neq i \leq n$$

Všimněte si, že $w_{ji} = w_{ij}$, tedy matice vah je symetrická.

Adaptaci lze vidět jako hlasování vzorů o vazbách neuronů: $w_{ji} = w_{ij}$ se rovná rozdílu mezi počtem souhlasných stavů $x_{kj} = x_{ki}$ neuronů i a j a počtem rozdílných stavů $x_{kj} \neq x_{ki}$.

Hopfieldova síť

Aktivní dynamika: Iniciálně jsou neurony nastaveny na vstup $\vec{x} = (x_1, \ldots, x_n)$ sítě, tedy $y_j^{(0)} = x_j$ pro každé $j = 1, \ldots, n$.

Cyklicky aktualizujeme stavy neuronů, tedy v kroku $t + 1$ aktualizujeme neuron j, t. ž. $j = (t \mod p) + 1$, takto:

nejprve vypočteme vnitřní potenciál

$$\xi_j^{(t)} = \sum_{i=1}^{n} w_{ji} y_i^{(t)}$$

a poté

$$y_j^{(t+1)} = \begin{cases} 1 & \xi_j^{(t)} > 0 \\ y_j^{(t)} & \xi_j^{(t)} = 0 \\ -1 & \xi_j^{(t)} < 0 \end{cases}$$

Hopfieldova síť - aktivní dynamika

Výpočet končí v kroku t^* pokud se síť nachází (poprvé) ve *stabilním* stavu, tj.

$$y_j^{(t^*+n)} = y_j^{(t^*)} \qquad (j = 1, \ldots, n)$$

Věta

Za předpokladu symetrie vah, výpočet Hopfieldovy sítě skončí pro každý vstup.

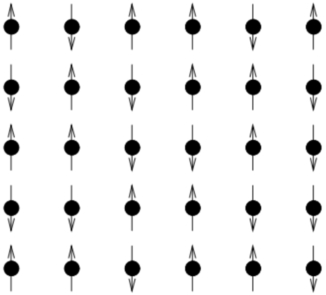
Z toho plyne, že Hopfieldova síť počítá funkci z $\{-1,1\}^n$ do $\{-1,1\}^n$ (která závisí na hodnotách vah neuronů).

Označme $\vec{y}(W,\vec{x}) = \left(y_1^{(t^*)}, \ldots, y_n^{(t^*)}\right)$ hodnotu funkce sítě pro vstup $\vec{x}$ a matici vah W. Dále označme $y_j(W,\vec{x}) = y_j^{(t^*)}$ složku hodnoty funkce sítě, která odpovídá neuronu j.

Pokud bude W jasné z kontextu, budu psát jen $y(\vec{x})$ a $y_j(\vec{x})$

Fyzikální analogie (Isingův model)

Jednoduché modely magnetických materiálů připomínají Hopfieldovu síť.



- atomické magnety poskládané do mřížky
- každý magnet může mít pouze jednu ze dvou orientací (v Hopfieldově síti $+1$ a -1)
- orientaci každého magnetu ovlivňuje jednak vnější magnetické pole (vstup sítě), jednak magnetické pole ostatních magnetů (závisí na jejich orientaci)
- synaptické váhy modelují vzájemnou interakci magnetů

Energetická funkce

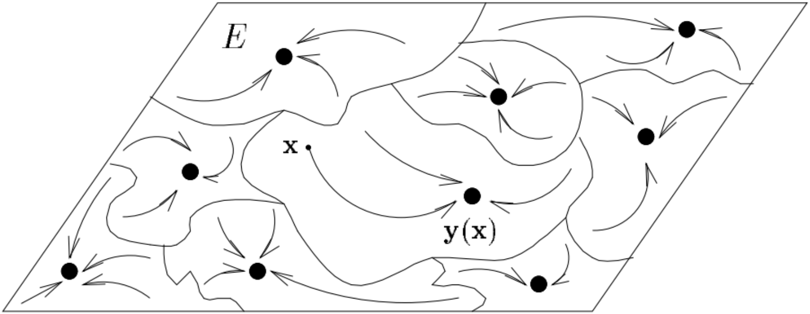
Energetická funkce E přiřazuje každému stavu sítě $\vec{y} \in \{-1, 1\}^n$ potenciální energii danou

$$E(\vec{y}) = -\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{n}\sum_{i=1}^{n} w_{ji} y_j y_i$$

- stavy s nízkou energií jsou stabilní (málo neuronů „chce" změnit svůj stav), stavy s vysokou energií jsou nestabilní
- tj. velké (kladné) $w_{ji} y_j y_i$ je stabilní a malé (záporné) $w_{ji} y_j y_i$ nestabilní

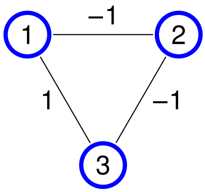
V průběhu výpočtu se energie nezvyšuje: $E(\vec{y}^{(t)}) \geq E(\vec{y}^{(t+1)})$, stav $\vec{y}^{(t^*)}$ odpovídá lokálnímu minimu funkce E.

Energetická plocha



Obr. 3.4: Energetická plocha.

Hopfield - příklad



y_1	y_2	y_3	E
1	1	1	1
1	1	−1	1
1	−1	1	−3
1	−1	−1	1
−1	1	1	1
−1	1	−1	−3
−1	−1	1	1
−1	−1	−1	1

- Hopfieldova síť se třemi neurony
- naučili jsme ji jeden vzor $(1, -1, 1)$ pomocí Hebbova učení (síť se automaticky „naučila“ i vzor $(-1, 1, -1)$)

Energetická funkce - konvergence výpočtu sítě

Pomocí pojmu energie lze snadno dokázat, že výpočet Hopfieldovy sítě vždy zastaví:

- v průběhu výpočtu se energie nezvyšuje:
  $E(\vec{y}^{(t)}) \geq E(\vec{y}^{(t+1)})$
- pokud dojde v kroku $t+1$ ke změně stavu, pak
  $E(\vec{y}^{(t)}) > E(\vec{y}^{(t+1)})$
- existuje pouze konečně mnoho stavů sítě: výpočet dosáhne lokálního minima funkce E, ze kterého už se nedostane

Hopfieldova síť - odučování

Při učení podle Hebbova zákona mohou vznikat lokální minima funkce E, tzv. nepravé vzory (*fantomy*), které neodpovídají tréninkovým vzorům.

Fantomy je možné odučovat např. pomocí následujícího pravidla: Mějme fantom $(x_1, \ldots, x_n) \in \{-1, 1\}^n$ a váhy w_{ji}, pak nové váhy w'_{ji} spočítáme pomocí

$$w'_{ji} = w_{ji} - x_i x_j$$

(tj. podobně jako při adaptaci podle Hebbova zákona, ale s opačným znaménkem)

Reprodukce - statistická analýza

Kapacita Hopfieldovy paměti je dána poměrem p/n.

Zde n je počet neuronů a p je počet vzorů.

Předpokládejme, že tréninkové vzory jsou voleny náhodně takto: při volbě $\vec{x}_k$ volím postupně (nezávisle) jednotlivé složky (1 s pravd. $1/2$ a -1 s pravd. $1/2$).

Uvažme konfiguraci W, kterou obdržíme Hebbovským učením na zvolených vzorech.

Označme

$$\beta = \mathbf{P}\left[\vec{x}_k = \vec{y}(W, \vec{x}_k) \text{ pro } k = 1, \ldots, p\right]$$

Pak pro $n \to \infty$ a $p \leq n/(4 \log n)$ dostaneme $\beta \to 1$.

Tj. maximální počet vzorů, které lze věrně uložit do Hopfieldovy paměti je úměrný $n/(4 \log n)$.

Hopfieldova síť - asociace

Problém:

- příliš mnoho vzorů implikuje existenci lokálních minim funkce E, která neodpovídají vzorům (tzv. *fantomy*)
- lokální minima pro vzory mohou dokonce zanikat

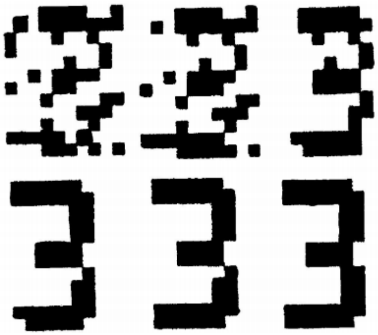
Podrobná analýza ukazuje následující

- Pro $p \leq 0.138n$ tréninkové vzory *zhruba* odpovídají lokálním minimům funkce E
- Pro $p > 0.138n$ lokální minima podobající se vzorům zanikají (ostrá nespojitost v 0.138)
- Pro $p < 0.05n$ energie stavů podobajících se tréninkovým vzorům odpovídají globálním minimům E a fantomy mají ostře větší energii

Tj. pro dobré zapamatování 10 vzorů je potřeba 200 neuronů a tedy 40000 spojů ohodnocených celočíselnými váhami

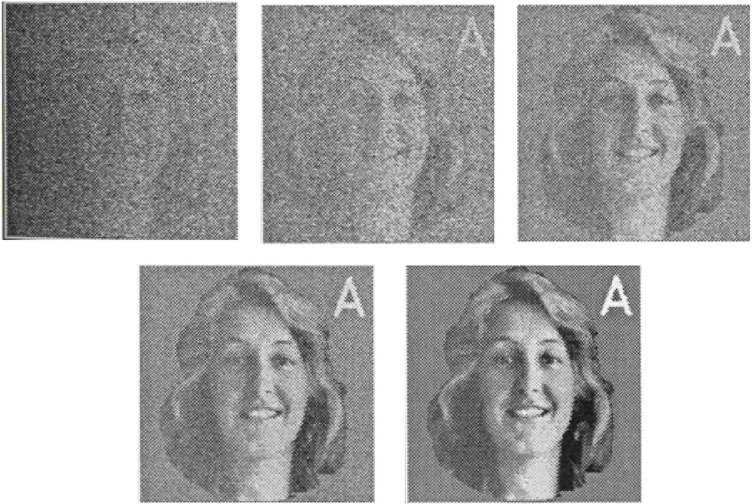
Pozn. Nevýhodou Hopfieldovy sítě je deterministický výpočet, který může skončit v mělkém lokálním minimu E bez možnosti uniknout. Tento problém částečně vyřeší stochastická verze aktivní dynamiky.

Hopfieldova síť - příklad kódování

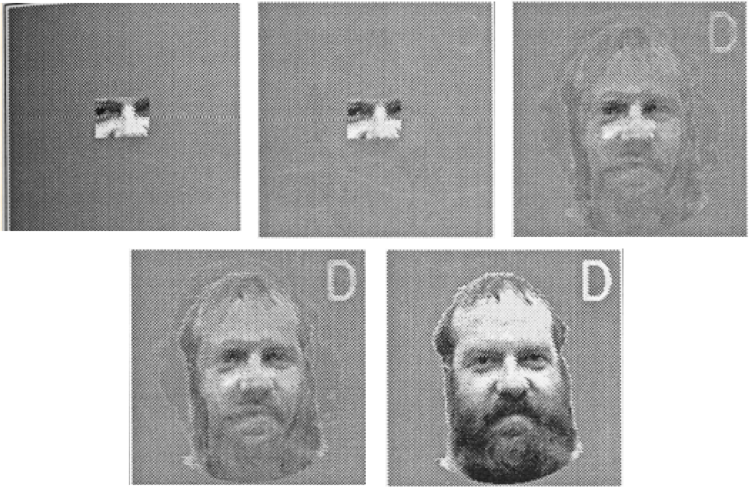


- číslice 12×10 bodů
  (120 neuronů, -1 je bílá a 1 je černá)
- naučeno 8 číslic
- vstup vygenerován ze vzoru 25% šumem
- obrázek ukazuje postup výpočtu Hopfieldovy sítě

Hopfieldova síť - příklad obnovení vzoru



Hopfieldova síť - příklad rekonstrukce vzoru



Hopfieldova síť (pro optimalizační úlohy)

Autoasociativní síť.

Organizační dynamika:

- úplná topologie, tj. každý neuron je spojen s každým
- všechny neurony jsou současně vstupní i výstupní
- označme $\xi_1, \ldots, \xi_n$ vnitřní potenciály a $y_1, \ldots, y_n$ výstupy (stavy) jednotlivých neuronů
- označme w_{ji} *celočíselnou* váhu spoje od neuronu $i \in \{1, \ldots, n\}$ k neuronu $j \in \{1, \ldots, n\}$.
- přepokládáme $w_{jj} = 0$ pro každé $j = 1, \ldots, n$.
- **Nyní:**
  - každý neuron má bias θ_i
  - stavy neuronů jsou z $\{0, 1\}$

Hopfieldova síť (s biasy)

Aktivní dynamika: Iniciálně jsou neurony nastaveny na vstup $\vec{x} = (x_1, \ldots, x_n) \in \{0, 1\}^n$ sítě, tedy $y_j^{(0)} = x_j$ pro $j = 1, \ldots, n$.

V kroku $t + 1$ aktualizujeme neuron j, t. ž. $j = (t \mod p) + 1$, takto:

nejprve vypočteme vnitřní potenciál

$$\xi_j^{(t)} = \sum_{i=1}^{n} w_{ji} y_i^{(t)} - \theta_j$$

a poté

$$y_j^{(t+1)} = \begin{cases} 1 & \xi_j^{(t)} > 0 \\ y_j^{(t)} & \xi_j^{(t)} = 0 \\ 0 & \xi_j^{(t)} < 0 \end{cases}$$

Hopfieldova síť - aktivní dynamika

Výpočet končí v kroku t^* pokud se síť nachází (poprvé) ve *stabilním* stavu, tj.

$$y_j^{(t^*+n)} = y_j^{(t^*)} \qquad (j = 1, \dots, n)$$

Energetická funkce E přiřazuje každému stavu sítě $\vec{y} \in \{0,1\}^n$ potenciální energii danou

$$E(\vec{y}) = -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^{n} \sum_{i=1}^{n} w_{ji} y_j y_i + \sum_{i=1}^{n} \theta_i y_i$$

V průběhu výpočtu se energie nezvyšuje: $E(\vec{y}^{(t)}) \geq E(\vec{y}^{(t+1)})$, stav $\vec{y}^{(t^*)}$ odpovídá lokálnímu minimu funkce E.

Věta

Za předpokladu symetrie vah, výpočet Hopfieldovy sítě skončí pro každý vstup.

(Důkaz stejný jako předtím)

Hopfieldova síť a optimalizační úlohy

Optimalizační úloha je zadána množinou přípustných řešení a účelovou funkcí. Cílem je nalézt přípustné řešení, které minimalizuje účelovou funkci U.

Pro mnoho optimalizačních úloh lze nalézt Hopfieldovu síť takovou, že

- minima $E \approx$ přípustná řešení vzhledem k U
- globální minima $E \approx$ řešení minimalizující U

Cílem je nalézt globální minimum funkce E (a tedy i U).

Příklad: multiflop

Cílem je nalézt vektor z $\{0,1\}^n$, který má všechny složky nulové kromě právě jedné.

Definujeme účelovou funkci $U : \{0,1\}^n \to \mathbb{R}$ takto:

$$U(\vec{u}) = \left(\left(\sum_{i=1}^{n} u_i\right) - 1\right)^2$$

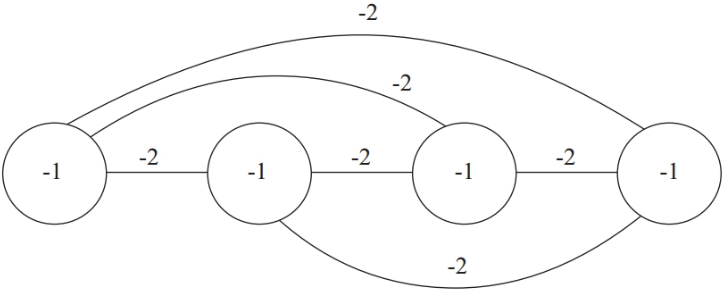
Požadované vektory jsou právě minima této funkce.

Ale

$$U(\vec{u}) = -\frac{1}{2}\sum_{i \neq j}^{n}(-2)u_i u_j + \sum_{i=1}^{n}(-1)u_i + 1$$

a tedy $U(\vec{u}) - 1$ je energetickou funkcí sítě (viz. následující slajd).

Příklad: multiflop (síť)



$$E(\vec{u}) = -\frac{1}{2}\sum_{i\neq j}^{n}(-2)u_i u_j + \sum_{i=1}^{n}(-1)u_i$$

Příklad: *n* věží

Cílem je rozmístit n věží na šachovnici $n \times n$ tak, aby se vzájemně neohrožovaly.

Definujeme účelovou funkci $U_1 : \{0,1\}^{n \cdot n} \to \mathbb{R}$:

$$U_1(\vec{u}) = \sum_{j=1}^{n} \left(\left(\sum_{i=1}^{n} u_{ji} \right) - 1 \right)^2$$

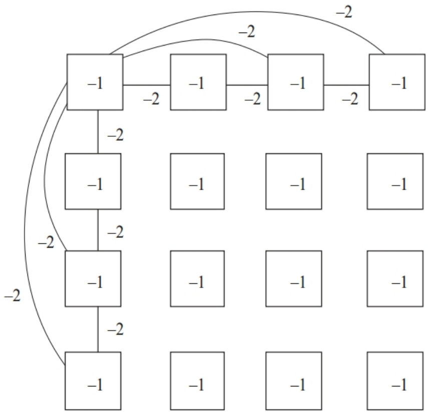
a $U_2 : \{0,1\}^{n \cdot n} \to \mathbb{R}$:

$$U_2(\vec{u}) = \sum_{i=1}^{n} \left(\left(\sum_{j=1}^{n} u_{ji} \right) - 1 \right)^2$$

Požadované vektory jsou právě minima funkce $U = U_1 + U_2$.

Minima U odpovídají stavům s minimální energií v síti na tabuli.

Příklad: *n* věží (síť)



$$E(\vec{u}) = U(\vec{u}) - 2n$$

(Tento příklad se dá zobecnit na problém obchodního cestujícího)

Hopfieldova síť a lokální minima

Hledáme (globální) minima energie E ....

Problém: není jasné, v jakém stavu začít, abychom dosáhli globálního minima. Síť může skončit v mělkém minimu.

Řešení: V každém stavu umožníme s malou pravděpodobností přechod do stavů s vyšší energií. Tuto pravděpodobnost budeme postupně snižovat. Využijeme dynamiku Boltzmannova stroje ...

„Boltzmannovská“ aktivní dynamika

Aktivní dynamika: Stavy neuronů jsou iniciálně nastaveny na hodnoty z množiny $\{0, 1\}$, tj. $y_j^{(0)} \in \{0, 1\}$ pro $j \in \{1, \ldots, n\}$.

V kroku $t + 1$ aktualizujeme náhodně vybraný neuron $j \in \{1, \ldots, n\}$ takto: nejprve vypočteme vnitřní potenciál

$$\xi_j^{(t)} = \sum_{i=1}^{n} w_{ji} y_i^{(t)} - \theta_j$$

a poté náhodně zvolíme hodnotu $y_j^{(t+1)} \in \{0, 1\}$ tak, že

$$\mathbf{P}\left[y_j^{(t+1)} = 1\right] = \sigma\left(\xi_j^{(t)}\right)$$

kde

$$\sigma(\xi) = \frac{1}{1 + e^{-2\xi/T(t)}}$$

Parametr $T(t)$ se nazývá **teplota** v čase t.

Teplota a energie

- Velmi vysoká teplota $T(t)$ znamená, že $\mathbf{P}\left[y_j^{(t+1)} = 1\right] \approx \frac{1}{2}$ a síť se chová téměř (uniformně) náhodně.
- Velmi nízká teplota $T(t)$ znamená, že buď $\mathbf{P}\left[y_j^{(t+1)} = 1\right] \approx 1$ nebo $\mathbf{P}\left[y_j^{(t+1)} = 1\right] \approx 0$ v závislosti na tom, jestli $\xi_j^{(t)} > 0$ nebo $\xi_j^{(t)} < 0$. Potom se sít chová téměř deterministicky (tj. jako v původní aktivní dynamice).

Poznámky:

- Boltzmannovská aktivní dynamika funguje jako deterministická dynamika s náhodným šumem,
- energie $E(\vec{y}) = -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^{n} \sum_{i=1}^{n} w_{ji} y_j y_i + \sum_{i=1}^{n} \theta_i y_i$ se může (s pravděpodobností závislou na teplotě) zvýšit,
- pravděpodobnost přechodů do vyšší energetické hladiny se exponenciálně zmenšuje s velikostí energetického skoku.

Simulované žíhání

Následujícím postupem lze dosáhnout globálního minima funkce E:

- Na začátku výpočtu nastavíme vysokou teplotu $T(t)$
- Teplotu postupně snižujeme, např takto:
  - $T(t) = \eta^t \cdot T(0)$ kde $\eta < 1$ je blízko 1
  - nebo $T(t) = T(0)/\log(1+t)$

Lze dokázat, že při vhodném postupu chlazení dosáhneme globálního minima.

Pozn:

- Tento proces je analogií žíhání používané při výrobě tvrdých kovových materiálů s krystalickou strukturou: materiál se nejprve zahřeje, čímž se poruší vazby mezi atomy, v průběhu následného pomalého chlazení se materiál „usadí“ do stavu s minimální vnitřní energií a s pravidelnou vnitřní strukturou.
- Jedná se také o rozšíření fyzikální motivace Hopfieldovy sítě: orientace magnetů jsou ovlivněny nejen vnitřním a vnějším magnetickým polem, ale také termálními fluktuacemi.