SZTUCZNA INTELIGENCJA

SZTUCZNE SIECI NEURONOWE - REGRESJA

Dr hab. inż. Grzegorz Dudek
Wydział Elektryczny
Politechnika Częstochowska

Projekt finansowany w ramach programu Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego pod nazwą „Regionalna Inicjatywa Doskonałości" w latach 2019 - 2022 nr projektu 020/RID/2018/19 kwota finansowania 12 000 000 PLN

PROBLEM APROKSYMACJI FUNKCJI

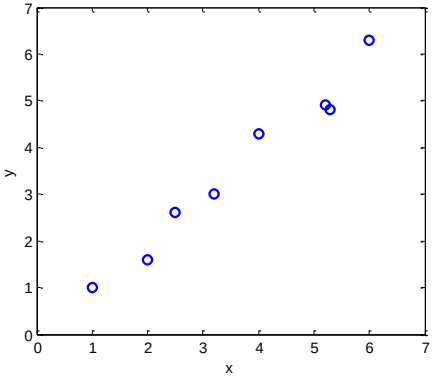
Aproksymacja funkcji – przybliżanie funkcji, polegające na wyznaczaniu dla danej funkcji $f(x)$ takiej funkcji $h(x)$, która w określonym sensie najlepiej ją przybliża. Przybliżenie w tym wypadku rozumiane jest jako minimalizacja pewnej funkcji błędu. Często miarą błędu jest średni błąd kwadratowy.

Typowe zadanie aproksymacji – dany jest zbiór punktów (np. pomiarowych)

Zakładamy postać funkcji aproksymującej, np. funkcję liniową:

$$h(x) = ax + b$$

gdzie a i b to współczynniki, które należy tak dobrać, aby błąd aproksymacji był jak najmniejszy.

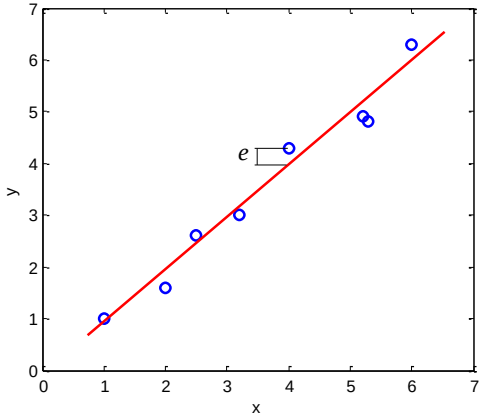


PROBLEM APROKSYMACJI FUNKCJI

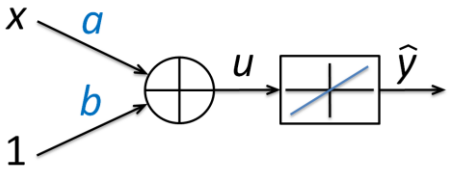
Błąd aproksymacji (*M* oznacza liczbę punktów):

$$E = \sum_{i=1}^{M} \left(y_i - h(x_i) \right)^2 = \sum_{i=1}^{M} e_i^2 \rightarrow \min$$

W wyniku otrzymujemy aproksymantę:

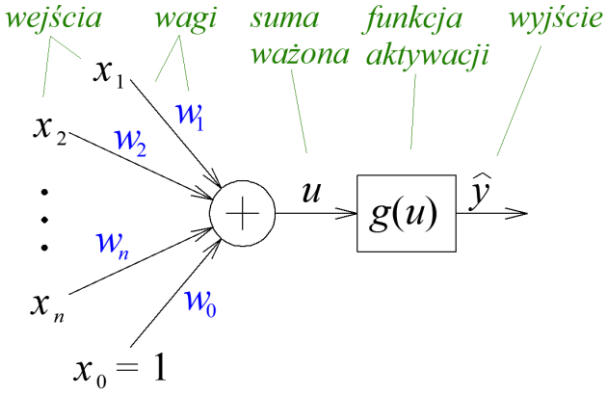


Reprezentacja graficzna funkcji aproksymującej:



MODEL NEURONU

W przypadku aproksymacji funkcji wielowymiarowej, model ma postać:



Jest to model neuronu, który realizuje funkcję:

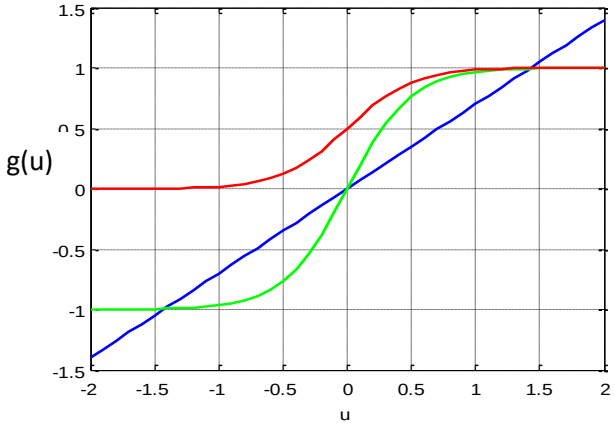
$$h(\mathbf{x}) = g\left(\sum_{j=0}^{n} x_j w_j\right)$$

Funkcje najczęściej używane jako funkcje aktywacji:

1. sigmoidalna unipolarna: $g(u) = \frac{1}{1+\exp(-\beta u)}$

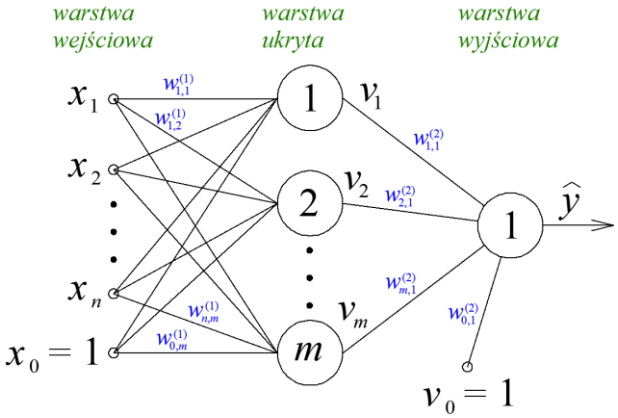
2. sigmoidalna bipolarna: $g(u) = \frac{2}{1+\exp(-\beta u)} - 1$ lub $g(u) = tgh(\beta u)$

3. liniowa: $g(u) = \beta u$



Pojedynczy neuron ma ograniczone zdolności aproksymacyjne. Aby aproksymować bardziej złożone funkcje łączy się wiele neuronów w sieć. Funkcje realizowane przez neurony dają po złożeniu dobrą aproksymantę.

Udowodniono, że sieć taka, zwana wielowarstwowym perceptronem, może aproksymować dowolną funkcję z dowolnie małym błędem.



Sieć może posiadać więcej niż jedną warstwę ukrytą oraz więcej niż jeden neuron na wyjściu.

Sieć uczymy na zbiorze treningowym (uczącym) złożonym z wektorów wejściowych (zmiennych niezależnych) **x** i skojarzonych z nimi wartości pożądanych odpowiedzi *y* (zmienna zależna). Sieć może mieć kilka wyjść, wtedy mamy do czynienia z wektorem pożądanej odpowiedzi **y**. Każdą parę **x** i *y* nazywamy wzorcem uczącym.

Uczenie przebiega iteracyjnie:

1. Na wstępie losujemy wagi sieci i dobieramy parametry uczenia sieci.

2. Na wejście sieci podajemy (prezentujemy) *i*-ty wektor wejściowy. Składowe tego wektora są przemnażane przez wagi pierwszej warstwy, następnie sumowane i przetwarzane przez funkcje aktywacji neuronów. Na wyjściu tych neuronów otrzymujemy wektor $\mathbf{v} = [v_1\ v_2\ \ldots\ v_m]$, którego składowe przemnażane są przez wagi drugiej warstwy, sumowane i przetwarzane przez funkcję aktywacji neuronu w warstwie wyjściowej. Otrzymujemy wyjście $\hat{y}$. Ponieważ wagi były losowe, to co otrzymujemy na wyjściu w pierwszym kroku jest przypadkowe. Możemy wyznaczyć błąd sieci:

$$e_i^2 = \frac{1}{2}(\hat{y}_i - y_i)^2 = \frac{1}{2}\left[g\left(\sum_{j=0}^{m} w_{j,1}^{(2)} v_j \right) - y_i \right]^2 = \frac{1}{2}\left[g\left(\sum_{j=1}^{m} w_{j,1}^{(2)} g\left(\sum_{k=0}^{n} w_{k,j}^{(1)} x_{i,k} \right) + w_{0,1}^{(2)} v_0 \right) - y_i \right]^2$$

   Błąd ten służy do korekty wag.

3. W fazie wstecznej propagacji błędu błąd wędruje od wyjścia w kierunku wejść. Najpierw błąd przechodzi na „drugą” stronę neuronu wyjściowego, wymaga to wyznaczenie pochodnej funkcji aktywacji tego neuronu. Następnie oblicza się składowe tego błędu wnoszone przez poszczególne wejścia neuronu wyjściowego i modyfikuje się wagi związane z tymi wejściami. Dalej sygnały błędu wędrują na „drugą” stronę neuronów ukrytych i wykorzystywane są do adaptacji wag związanych z wejściami tych neuronów. Po adaptacji wag błąd dla *i*-tego wzorca uczącego będzie mniejszy. Szczegółowy opis metody wstecznej propagacji błędu można znaleźć w [Oso].

4. Kroki 2 i 3 powtarzamy dla wszystkich wzorców uczących. Prezentacja wszystkich wzorców ze zbioru uczącego nazywa się epoką. Trening sieci wymaga wielu epok uczenia.

W efekcie uczenia minimalizowany jest błąd średniokwadratowy po wszystkich wzorcach uczących:

$$E = \sum_{i=1}^{M} e_i^2 \rightarrow \min$$

ALGORYTM WSTECZNEJ PROPAGACJI BŁĘDU

Celem jest minimalizacja funkcji błędu sieci:

$$E = e^2 = \frac{1}{2}(\hat{y} - y)^2 = \frac{1}{2}\left[g\left(\sum_{j=1}^{m} w_j^{(2)} v_j + w_0^{(2)} v_0 \right) - y \right]^2 = \frac{1}{2}\left[g\left(\sum_{j=1}^{m} w_j^{(2)} g\left(\sum_{k=0}^{n} w_{k,j}^{(1)} x_k \right) + w_0^{(2)} v_0 \right) - y \right]^2$$

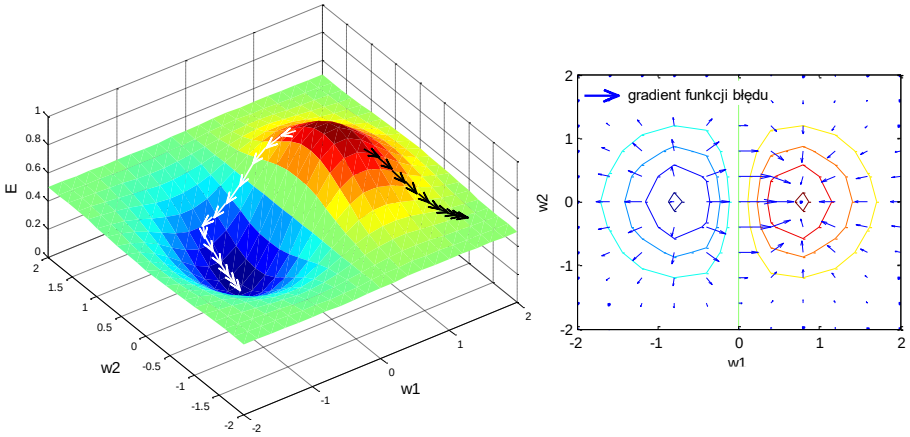
Do znalezienia minimum stosuje się metodę gradientową zwaną metodą największego spadku, zgodnie z którą przyrost wag określa się wg kierunku ujemnego gradientu:

$$\Delta \mathbf{w} = -\eta \nabla E(\mathbf{w})$$

gdzie **w** jest wektorem wag,
$\eta > 0$ współczynnikiem uczenia, a

$$\nabla E(\mathbf{w}) = \left[\frac{\partial E}{\partial w_{1,1}^{(1)}}, \frac{\partial E}{\partial w_{1,2}^{(1)}}, \ldots, \frac{\partial E}{\partial w_m^{(2)}} \right]$$

jest gradientem błędu.



Pochodne cząstkowe funkcji błędu względem wag warstwy wyjściwej:

$$\frac{\partial E}{\partial w_j^{(2)}} = (\hat{y} - y)\frac{\partial g(u^{(2)})}{\partial u^{(2)}} v_j \,,\ j = 0, 1, \ldots, m$$

gdzie $u^{(2)} = \sum_{j=1}^{m} w_j^{(2)} v_j + w_0^{(2)} v_0$.

Wprowadźmy oznaczenie: $\delta^{(2)} = (\hat{y} - y)\frac{\partial g(u^{(2)})}{\partial u^{(2)}}$, stąd regułę aktualizacji wag neuronu wyjściowego można zapisać:

$$\Delta w_j^{(2)} = -\eta \delta^{(2)} v_j \,.$$

Pochodne cząstkowe błędu względem wag warstwy ukrytej:

$$\frac{\partial E}{\partial w_{k,j}^{(1)}} = (\hat{y} - y)\frac{\partial \hat{y}}{\partial v_j}\frac{\partial v_j}{\partial w_{k,j}^{(1)}} = (\hat{y} - y)\left(\frac{\partial g(u^{(2)})}{\partial u^{(2)}} w_{k,j}^{(2)}\right)\left(\frac{\partial g(u_j^{(1)})}{\partial u_j^{(1)}} x_k\right),\quad j = 1, \ldots, m;\ k = 0, 1, \ldots, n$$

gdzie $u_j^{(1)} = \sum_{k=0}^{n} w_{k,j}^{(1)} x_k$.

Przyjmując oznaczenie: $\delta_j^{(1)} = (\hat{y} - y)\frac{\partial g(u^{(2)})}{\partial u^{(2)}} w_{k,j}^{(2)} \frac{\partial g(u_j^{(1)})}{\partial u_j^{(1)}} = \delta^{(2)} w_{k,j}^{(2)} \frac{\partial g(u_j^{(1)})}{\partial u_j^{(1)}}$ otrzymuje się $\frac{\partial E}{\partial w_{k,j}^{(1)}} = \delta_j^{(1)} x_k$

i wzór na aktualizację wag neuronów warstwy ukrytej:

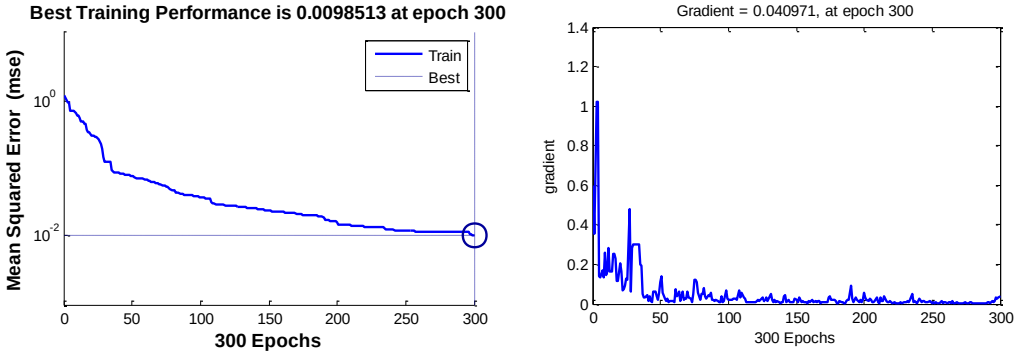
$$\Delta w_{k,j}^{(1)} = -\eta \delta_j^{(1)} x_k$$

Po wyznaczeniu poprawek dla wag dokonuje się aktualizacji wag:

$$\mathbf{w}(l+1) = \mathbf{w}(l) + \Delta \mathbf{w}$$

- Metoda wstecznej propagacji błędu wymaga, a by funkcje aktywacji były różniczkowalne.
- Skuteczność metody zależy od kształtu funkcji błędu (wielomodalność, płaskie obszary), punktu startowego wag, długości kroku (η).
- Algorytm utyka w minimach lokalnych.
- Istnieją inne metody uczenia, które w uproszczony sposób wyznaczają kierunek przesunięcia wektora wag (algorytmy: zmiennej metryki, Levenberga–Marquardta, gradientów sprzężonych).

Przykładowy przebieg błędu i jego gradient w kolejnych epokach



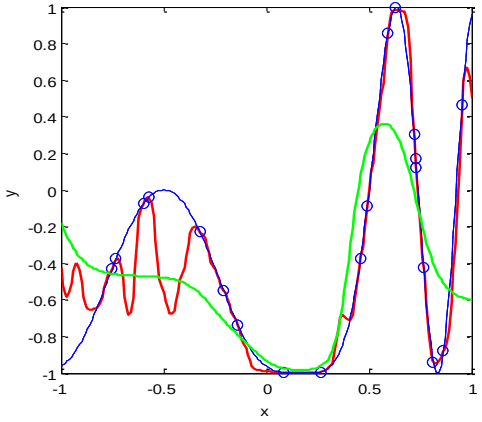
Po nauczeniu sieci sprawdzamy jej działanie na nowym zbiorze danych zwanym testowym. Błędy wyznaczone na tym zbiorze świadczą o jakości działania sieci.

PROBLEMY UCZENIA SIECI

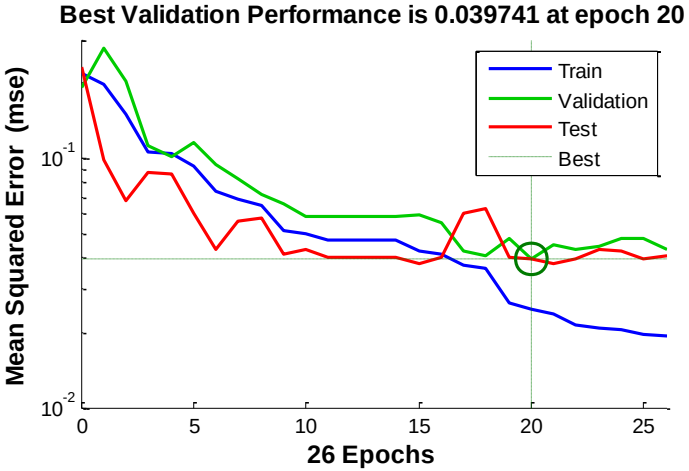
W procesie uczenia musimy rozstrzygnąć kilka problemów:

- jak długo sieć ma się uczyć
- ile powinno być neuronów w warstwie ukrytej
- jakie powinny być funkcje aktywacji neuronów
- jaką metodę uczenia wybrać
- czy i w jaki sposób wstępnie przetworzyć dane.

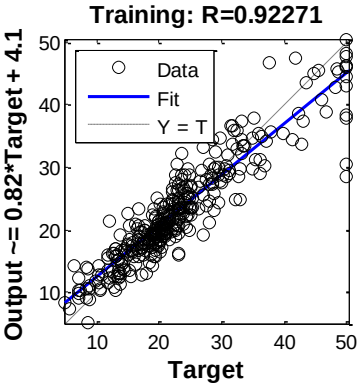
Jeśli trening jest zbyt krótki lub/i liczba neuronów zbyt mała sieć będzie niedouczona (duże błędy), zbyt długi trening lub/i zbyt duża liczba neuronów skutkuje przeuczeniem – błędy uzyskane na zbiorze uczącym będą bliskie 0, lecz błędy na zbiorze testowym okażą się duże.

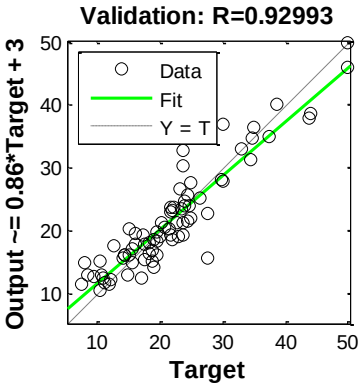


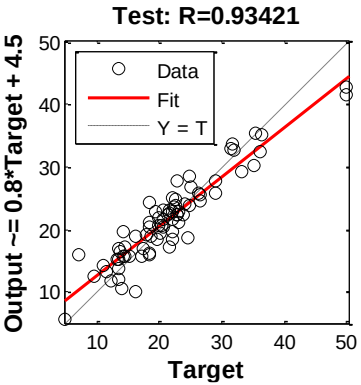
Sieć powinna posiadać zdolność uogólniania (generalizacji) zdobytej wiedzy na nowe przykłady, które nie uczestniczyły w procesie uczenia. Aby wzmocnić tę zdolność w trakcie uczenia w każdej epoce testuje się sieć na tzw. zbiorze walidacyjnym. Jeśli błąd na tym zbiorze przestaje maleć lub zaczyna wzrastać, co oznacza, że sieć traci zdolność uogólniania, przerywa się trening.

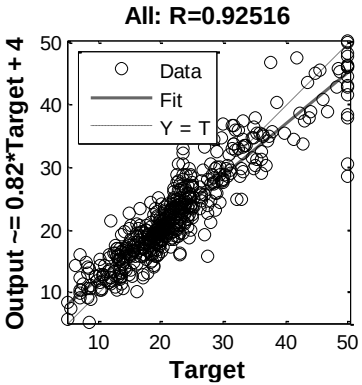


DOPASOWANIE MODELU









Współczynnik determinacji:

$$R^2 = \frac{\sum_{i=1}^{M}(\hat{y}_i - \bar{y})^2}{\sum_{i=1}^{M}(y_i - \bar{y})^2}$$

gdzie $\bar{y}$ – wartość średnia pożądanych odpowiedzi (target).

R^2=
0,0 - 0,5 - dopasowanie niezadowalające
0,5 - 0,6 - dopasowanie słabe
0,6 - 0,8 - dopasowanie zadowalające
0,8 - 0,9 - dopasowanie dobre
0,9 - 1,0 - dopasowanie bardzo dobre