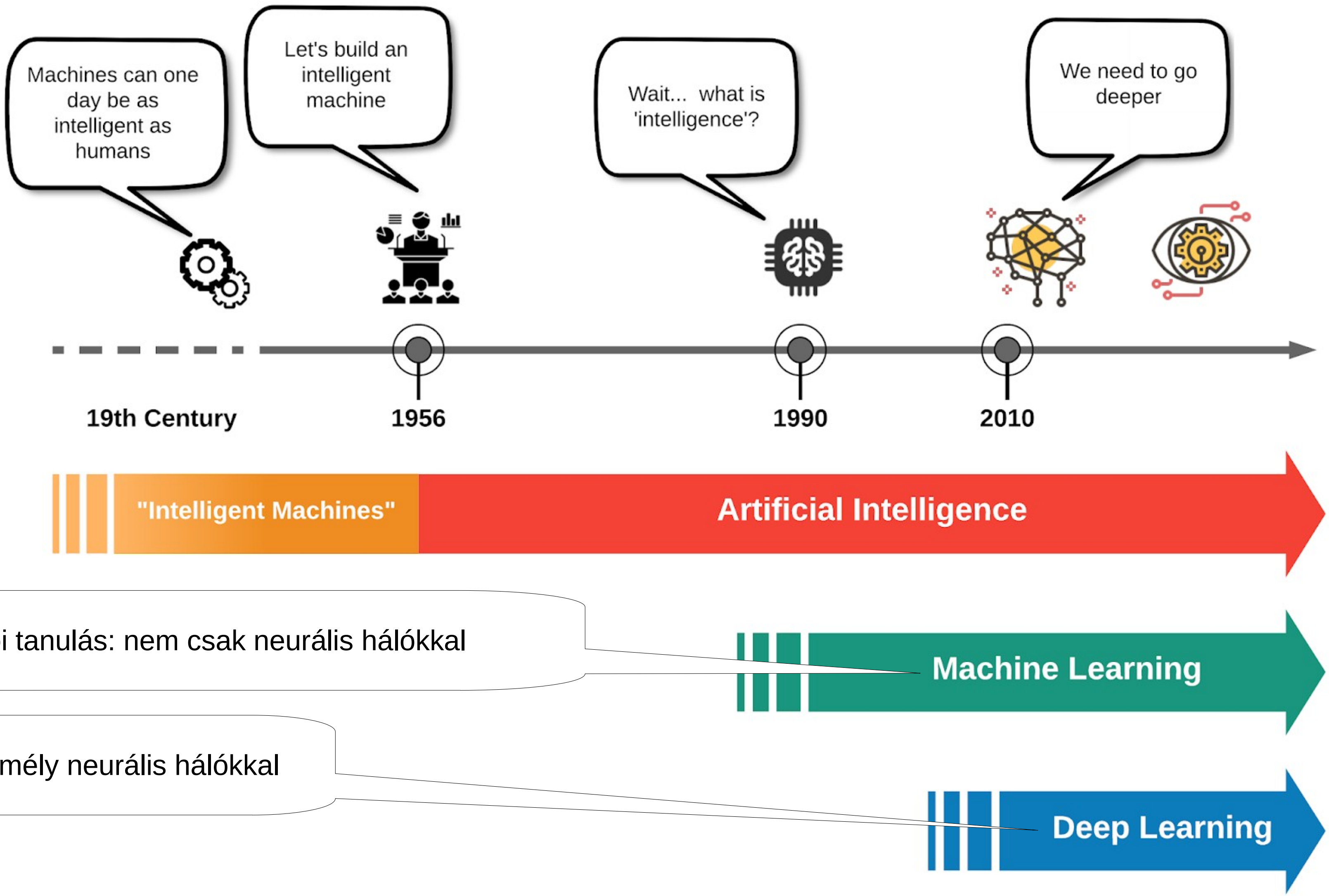
Mesterséges neurális hálózatok

Benyó Balázs, BME
bbenyo@iit.bme.hu

Mesterséges neurális hálózatok:
Neurális hálózatok története

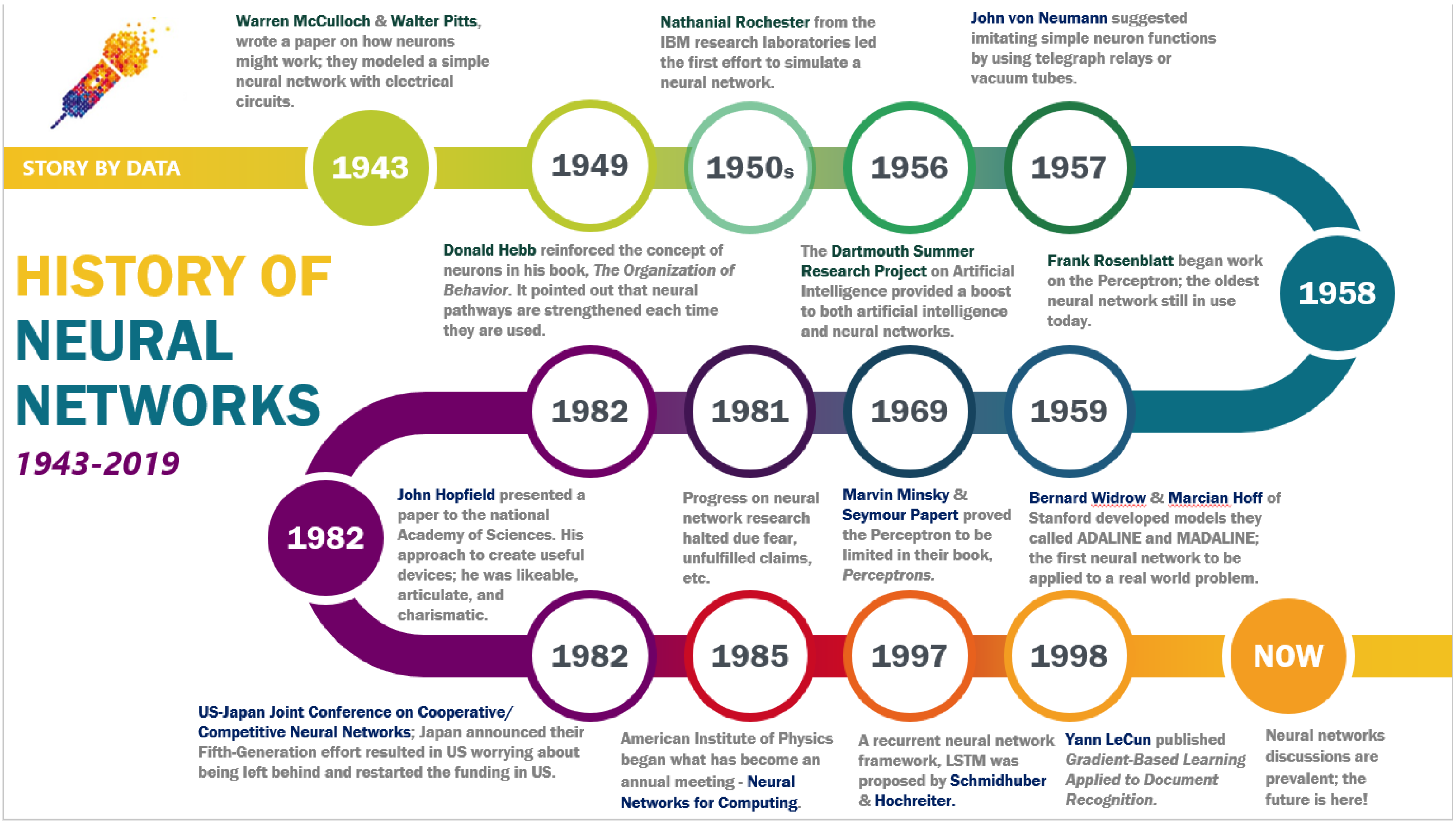
Fontos fogalmak



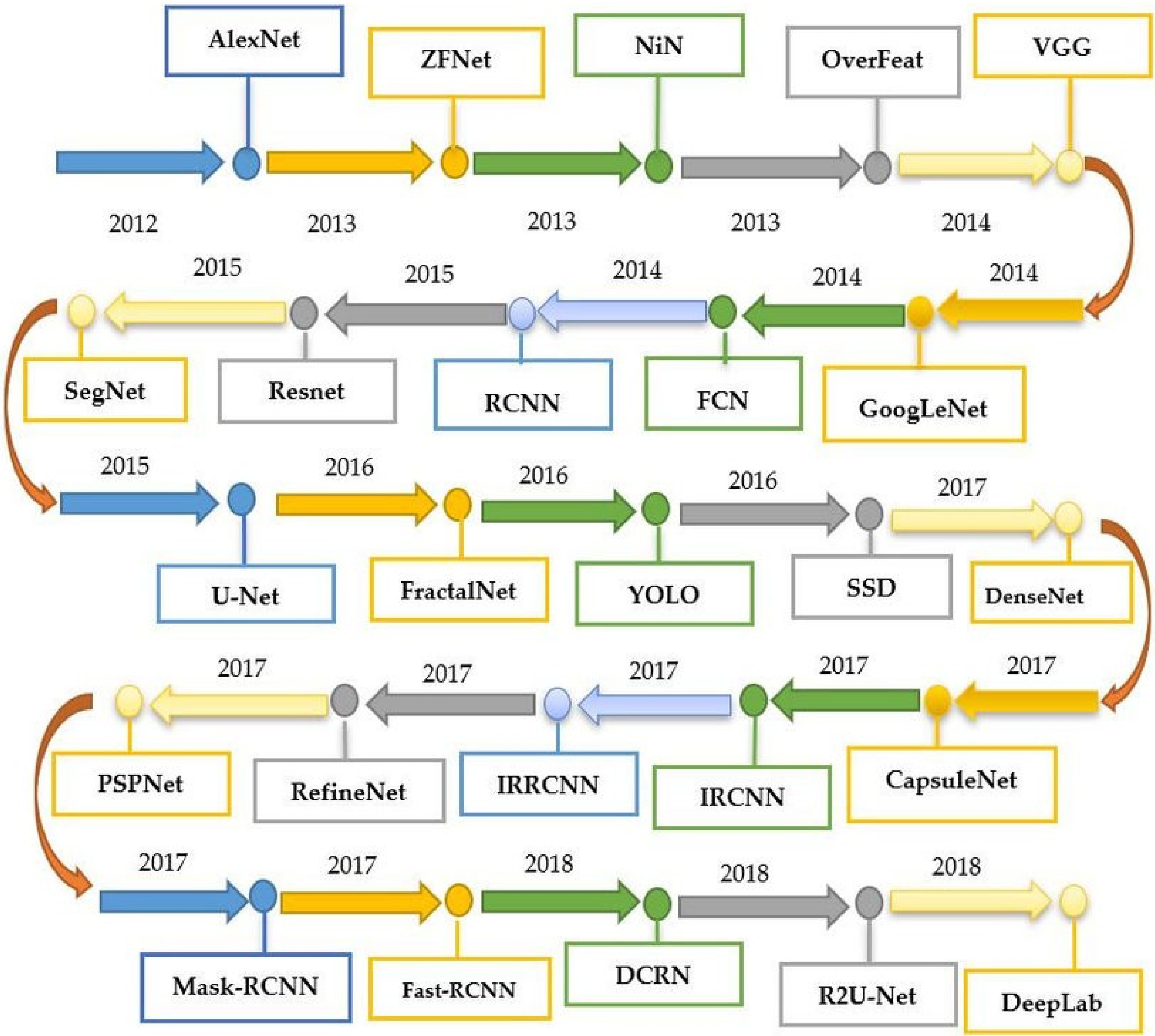
Gépi tanulás: nem csak neurális hálókkal

Tanulás mély neurális hálókkal

Történeti áttekintés a kezdetektől

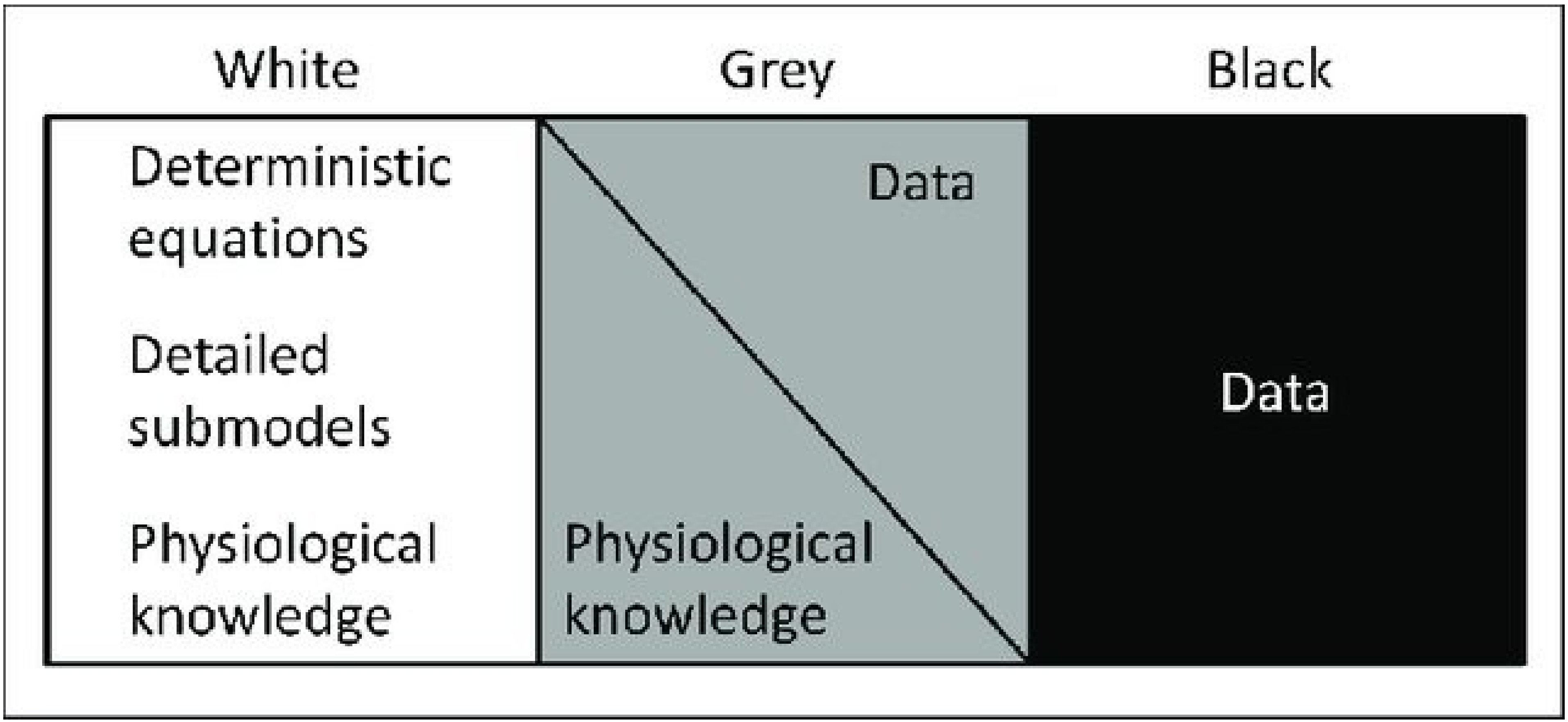


Konkrét neurális háló típusok megjelenési ideje a közelmúltban

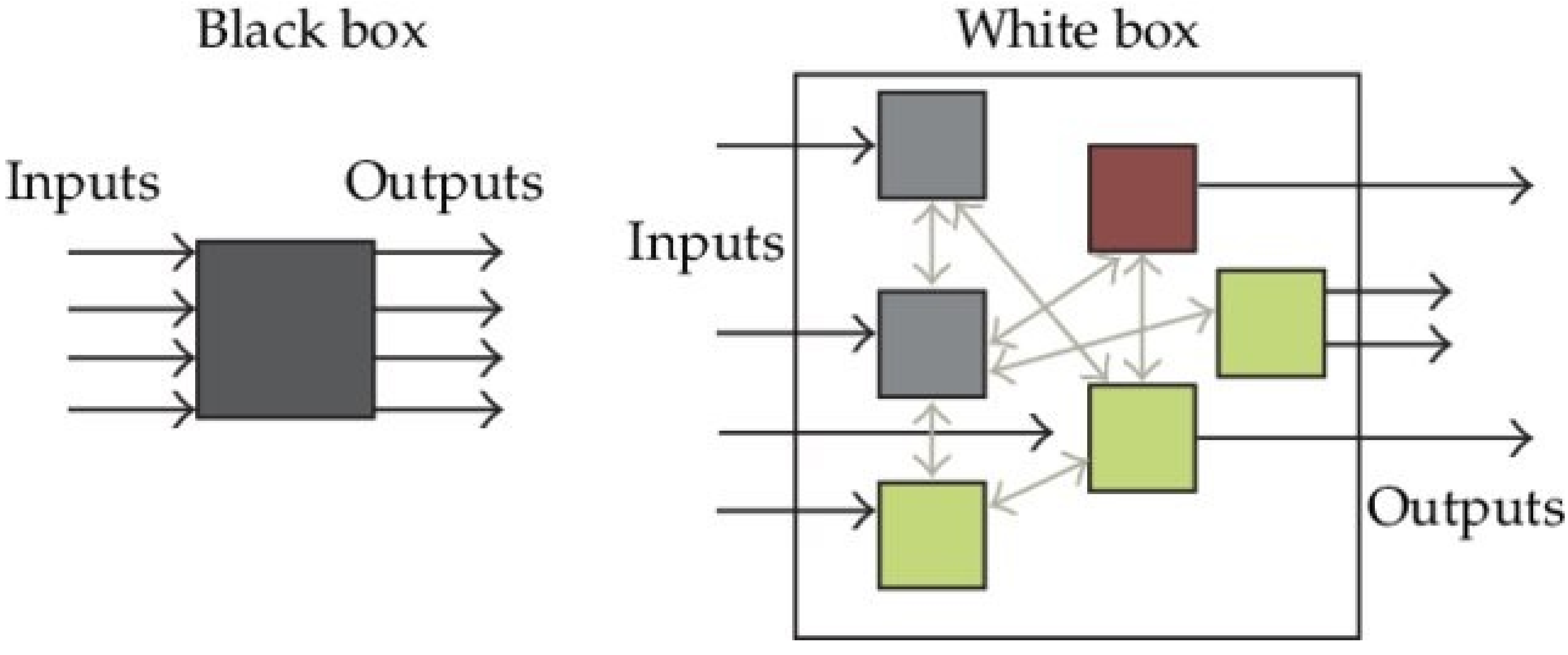


Mesterséges neurális hálózatok:
Modellek típusai

Modell típusokról általában



Black-box modell vs. white-box modell



Black-box modell vs. white-box modell

- **Black-box modell**
  - A rendszer **bemenetei** és **kimenetei** alapján határozzuk meg a modellt.
  - A modell interpretációja, a belső működés, a részrendszerek leírása **nem cél**.
  - Az esetleges modell hibák értelmezése, a rendszerre vonatkoztatható következtetések levonása, a hibák elemzése, javítása **nehéz**.

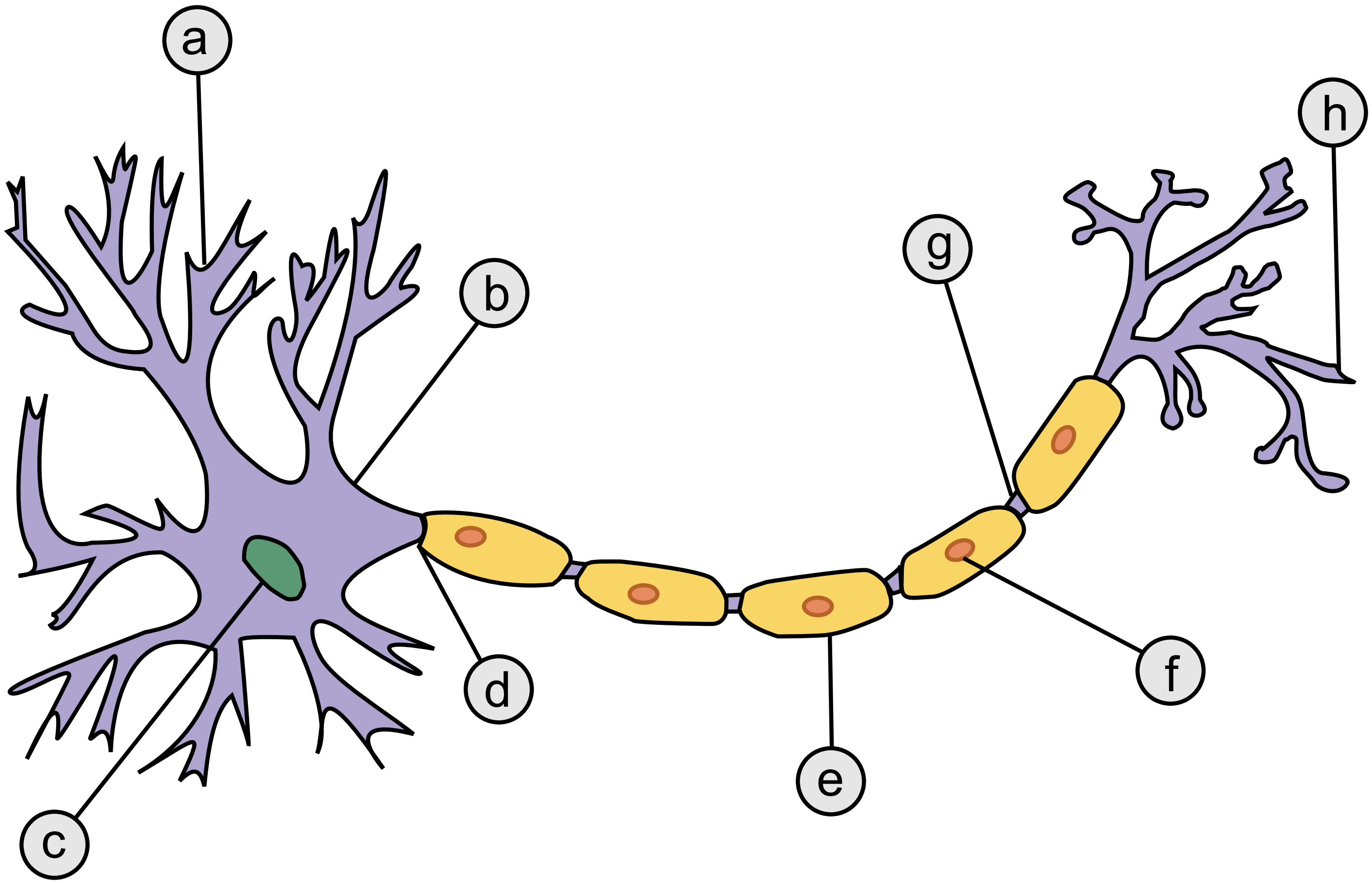
- **White-box modell**
  - A **rendszerben érvényes törvényszerűségek**, és részrendszerek **működésének ismeretében** határozzuk meg.
  - A modell elemei és a valóságos rendszer elemei közötti **összerendelés megadható**.
  - Az esetleges modell hibák értelmezése, a **rendszerre vonatkoztatható következtetések** levonása, a **hibák elemzése**, **javítása** általában **egyszerű**.

Mesterséges neurális hálózatok:
Fiziológiai analógia

Fiziológiai analógia

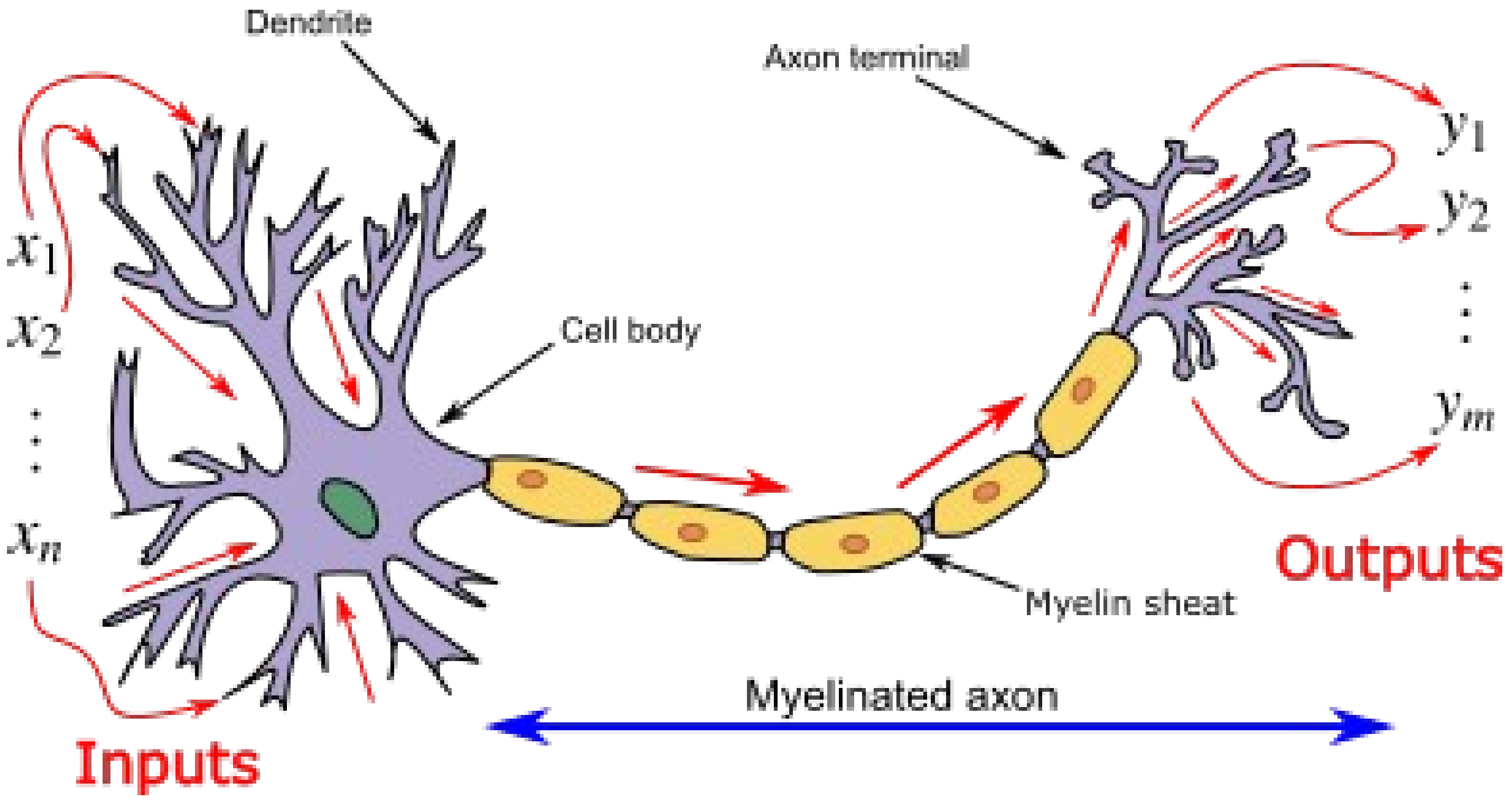
- **Analógia alapja:**
  - **Idegsejtek** hálózata
  - **Idegsejt** (neuron) sematikus **működése**:
    - Képes **ingerület átvitelre**, ill. továbbítására
    - Idegrendszer: agy, gerincvelő, idegdúcok
    - **Idegsejt** felépítése/működése:
      - Sejtmag, sejttest
      - Neuronok **kapcsolódása**:
        - **szinapszis** (synapse) keresztül (kémiai/elektromos)
        - Központi idegrendszer: nagyszámú kapcsolat (kimenet: ~10^3, bemenet: ~10^4)
      - **Dendrit**: beérkező ingerületet a sejttest felé továbbítja
      - **Axon**: hosszú nyúlvány
        - Ingerület továbbítása a környező neuronok felé
      - **Ingerület**: szétterjedő potenciál változás (akciós potenciál) a sejtmembránon

Gerincvelői mozgató neuron vázaltos képe

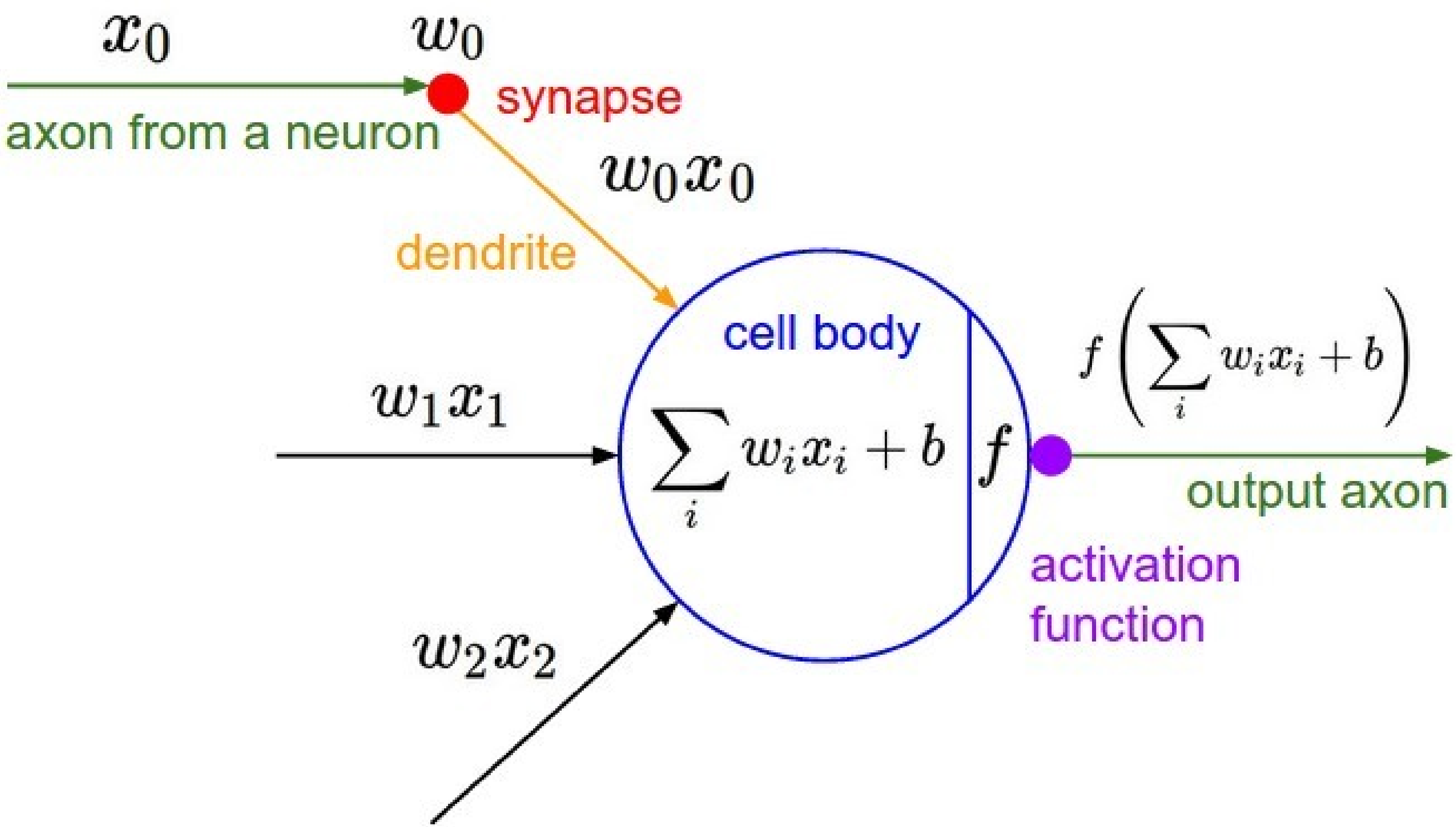


a. dendrit, b. sejttest, c. sejtmag, d. axondomb, e. Swann-hüvely, f. Swann-sejt (mag), g. Ranvier-féle befűződés, h. végfácska (telodendrion) elágazódás

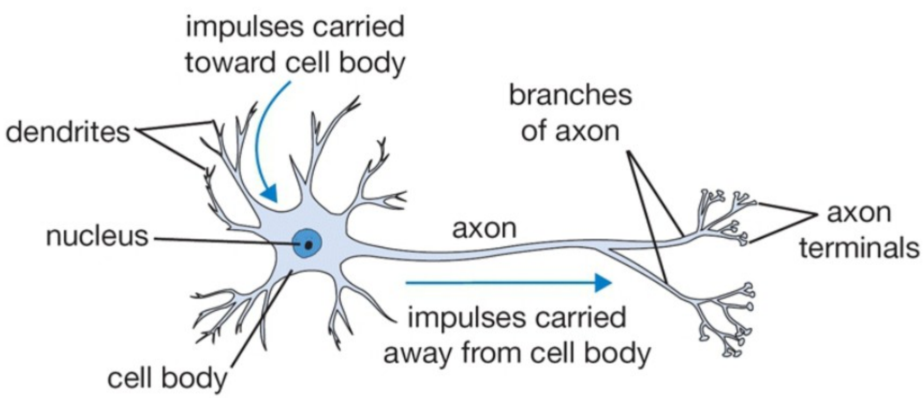
Idegsejt működésének analógiája

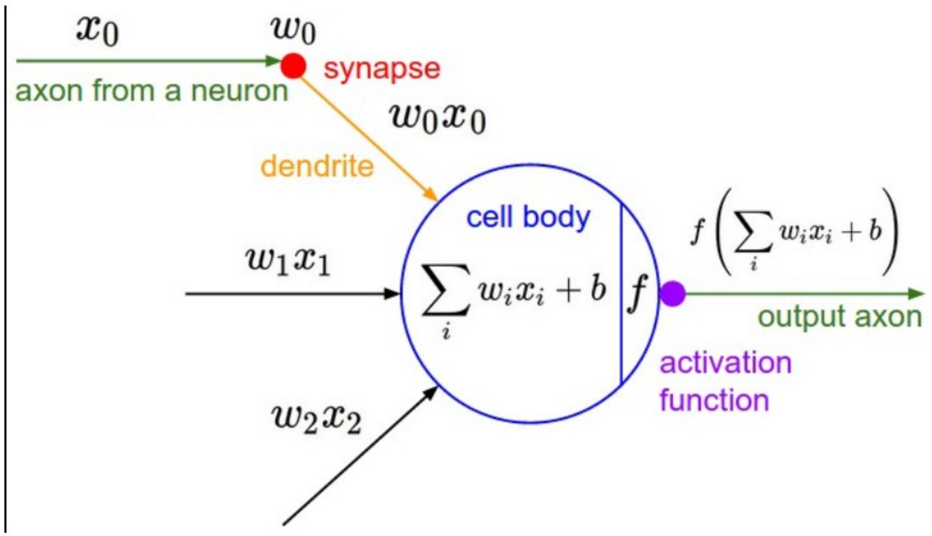


Neurális hálózat egy csomópontjának működése



Neurális hálózat egy csomópontja





https://cs231n.github.io/neural-networks-1/

Mesterséges neurális hálózatok: **Alapfogalmak**

Neurális hálózat felépítése

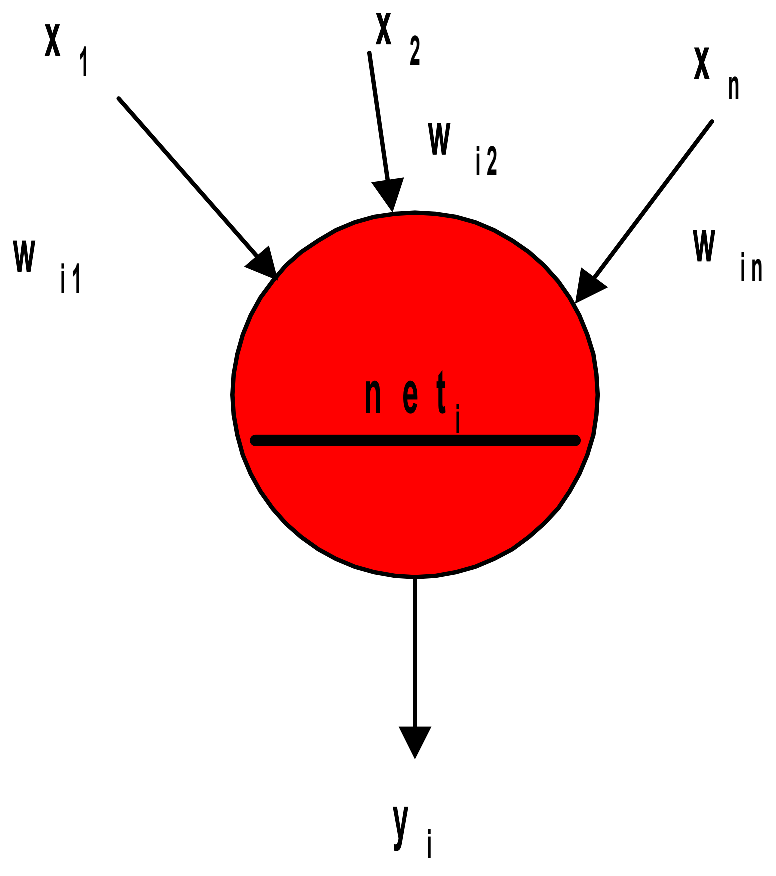
- **Gráf modell:** *irányított, súlyozott gráf*
  - **Csomópontok** (~*idegsejtek*)
  - **Irányított élek** (~*idegsejtek kapcsolatai, jelátvivő csatornák*)
  - **Súlyok** *(~neuronok kapcsolatának erősségére*)

Egy általános csomópont jelátvitele

- **Bejövő jelek** erőssége: x_j
- **Súlyok**: w_{ij}
- Csomópontba **belépő jel**: net_i
  - súlyozott összeg

$$net_i = \sum_{j=1}^{n} w_{ij} x_j$$

i-dik csomópont jelátvitele



Formális leírás

- **Csomópontba belépő jel**
  - Súlyok (w_i) és a bemenetek (x) vektorainak skalár szorzata:

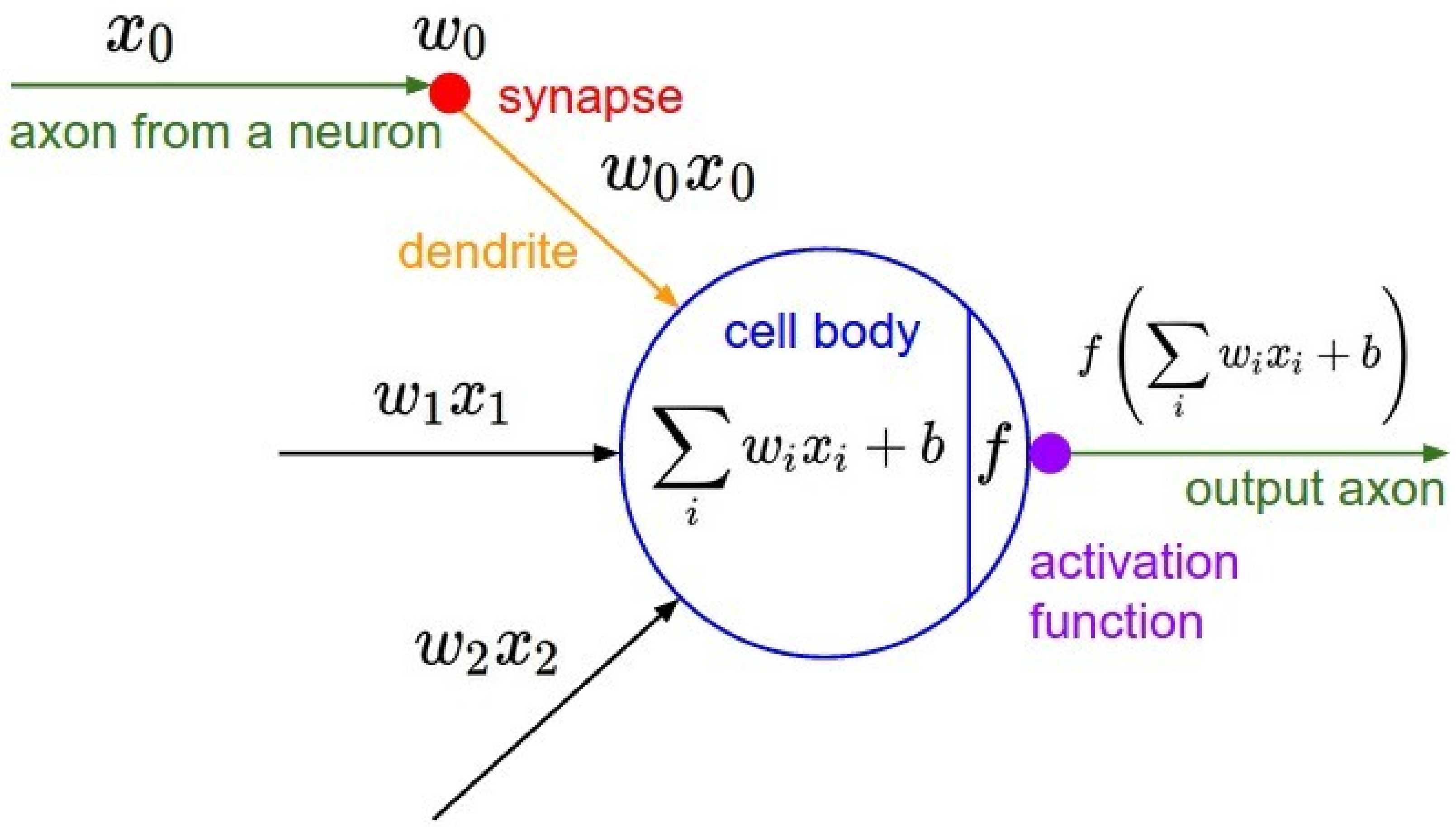
$$net_i = w_i^T x$$

- **Csomópontból kilépő jel:**

$$y_i = f(net_i) = f\left(w_i^T x\right)$$

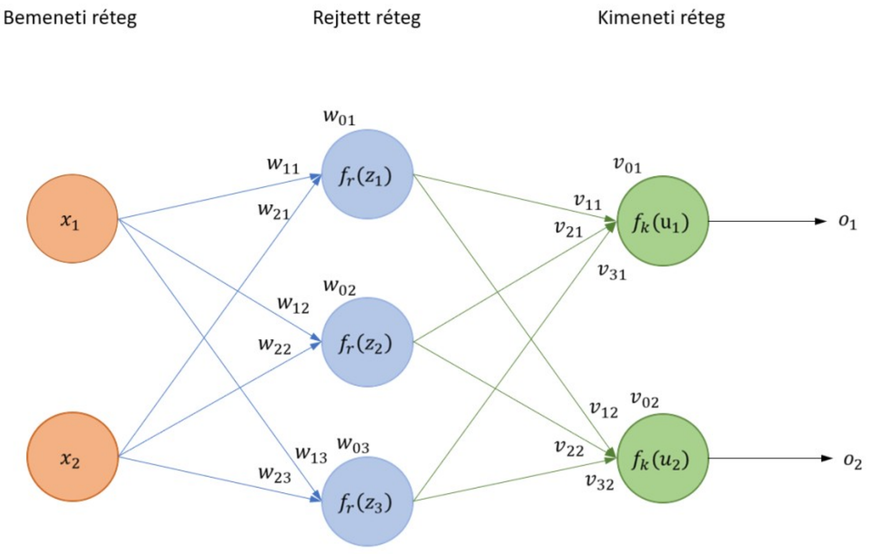
  - **Aktivációs függvény:** $f()$
- *A hálózat az **x** vektort **leképzi** az **y** vektorba*

Neurális hálózat csomópontjának általános működése

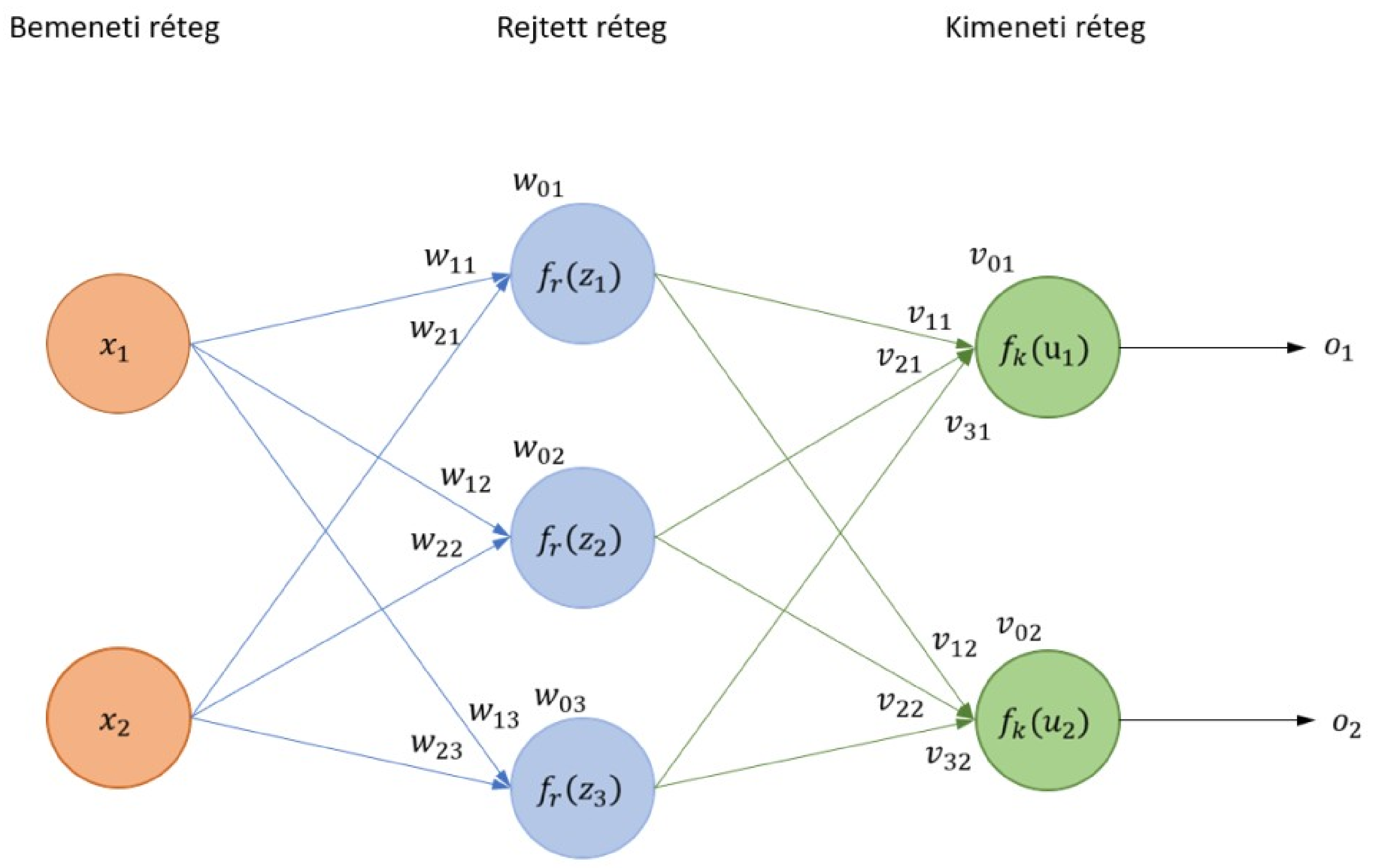


Neurális hálózat felépítése *(klasszikus előrecsatolt hálózat)*

- **Gráf modell:** *irányított, súlyozott gráf*
  - Csomópontok
  - Irányított élek (~*jelátvivő csatornák*)
  - Súlyok *(~neuronok kapcsolatának erősségére*)
- **Hálózati topológia – csomópontok rétegekbe rendezettek:**
  - Összeköttetés (*általában*) csak a **szomszédos rétegekben** levő csomópontok között (*feed-forward network*).
  - Számos más megoldás is létezik.
- **Rétegek:**
  - *Szükséges rétegek:*
    - *bemeneti réteg,*
    - *kimeneti réteg,*
  - *Opcionális réteg:*
    - *rejtett-réteg(ek)*



Három rétegű hálózat

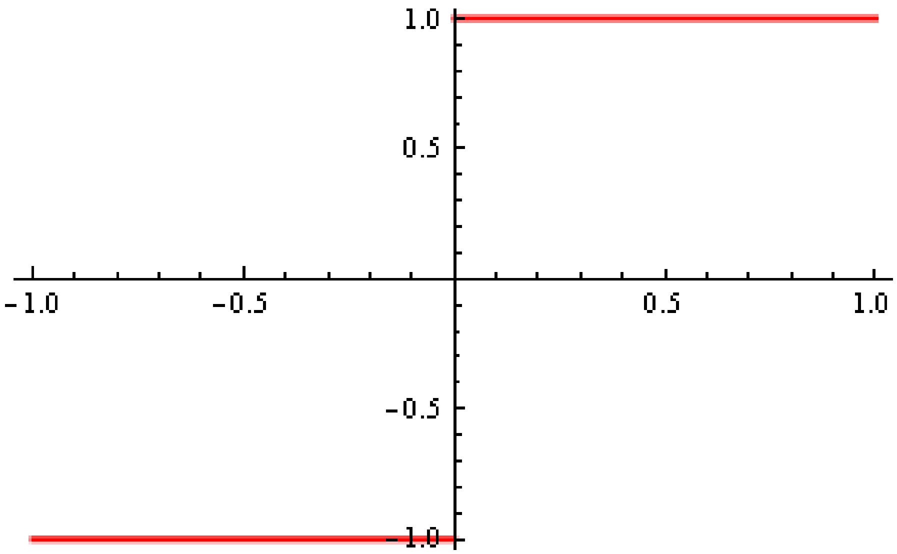


Aktivációs függvény (*f()*)

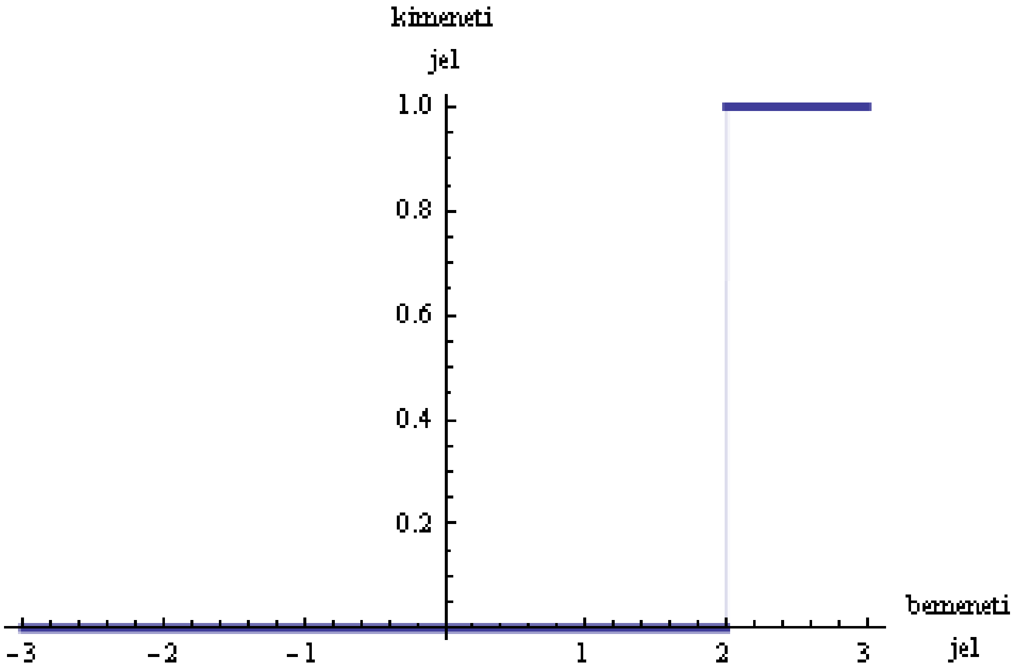
- A csomópont bemenetének és a kimenetének a **kapcsolatát** leíró függvény:
  - **aktivációs függvény –** általában nem lineáris
  - A hálózat **nem lineáris** viselkedését biztosítja
- Egyszerű aktivációs függvények:
  - Heaviside vagy **egységugrás függvény**
- Számos más aktivációs függvényt használunk
  - Neurális háló típusától függően
- Változatok a kimeneti **értékkészletre**:
  - {-1, +1} („bipoláris kimenet”)
  - {0, 1} (bináris kimenet)

Példák aktivációs függvényre

- **Signum** függvény
  - Értékkészlet: {-1, 1}
  - Eltolás nélkül



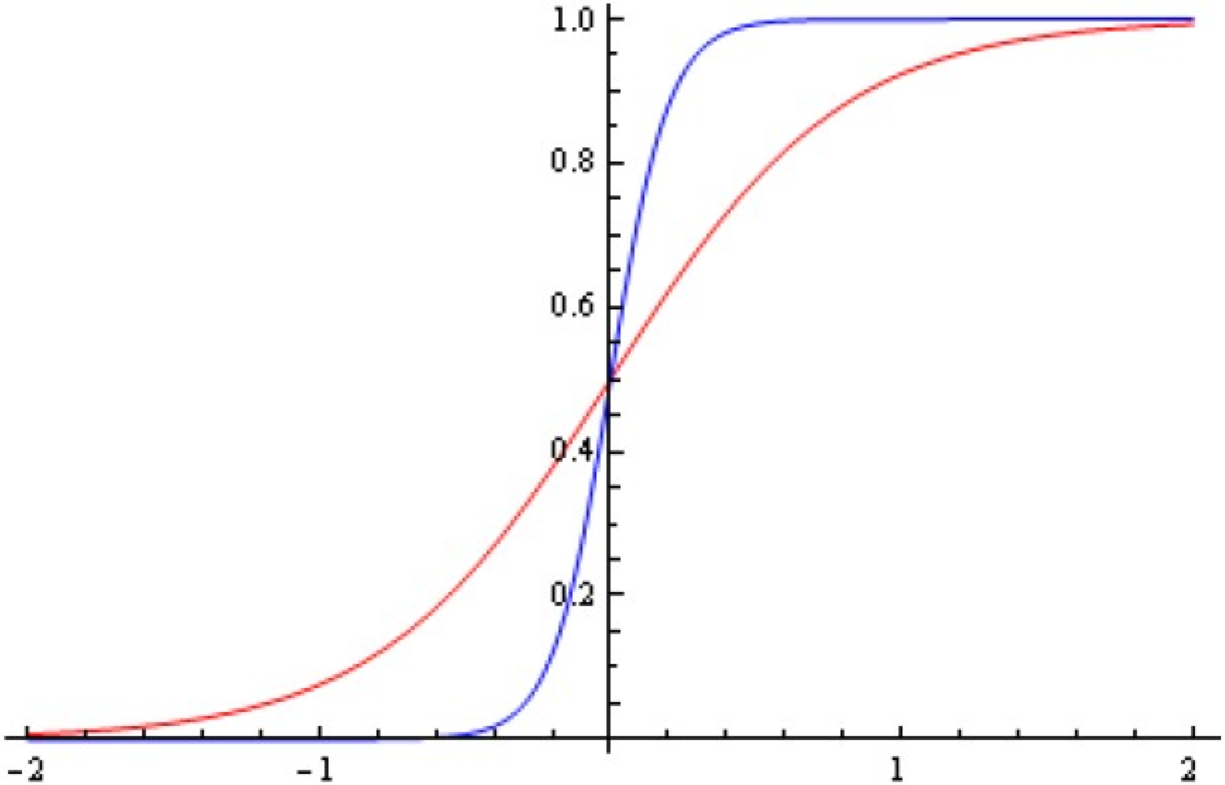
- **Egységugrás** fv.
  - Értékkészlet: {0, 1}
  - Eltolás = 2



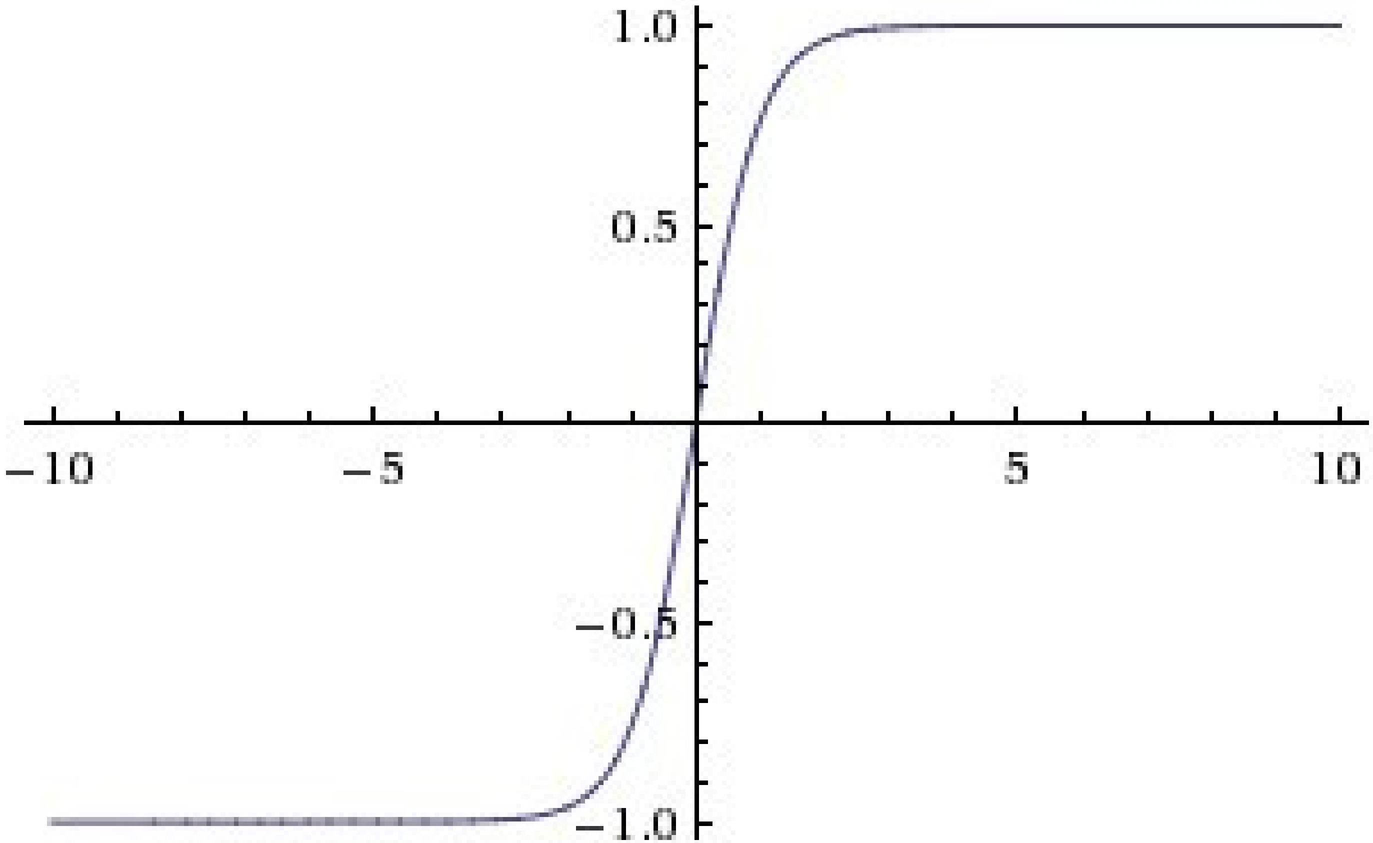
Példa folytonos aktivációs függvényre

- ***Szigmoid** függvény*
- → Folytonos kimeneti értékek előállítása

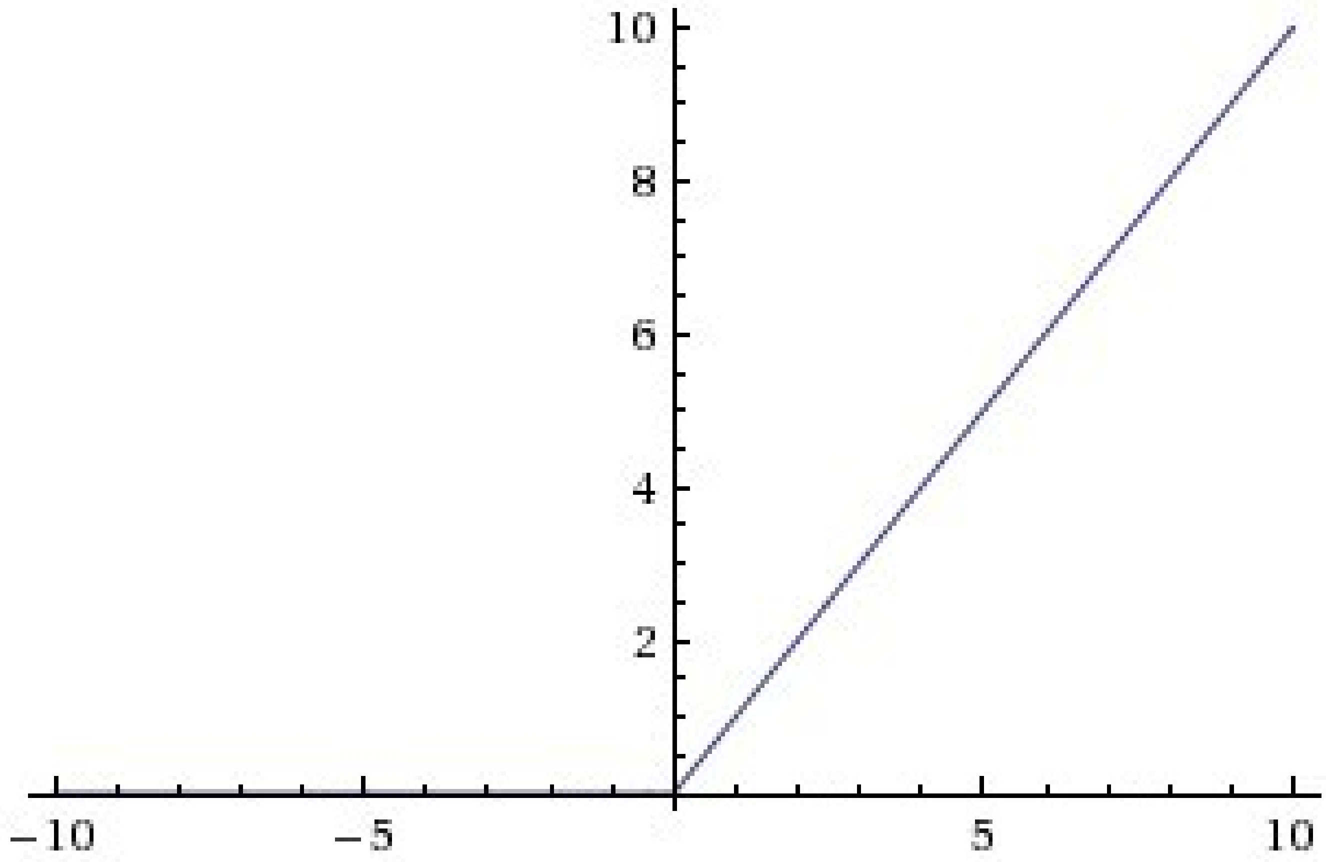
$$\sigma(x,\alpha) = \frac{1}{1+e^{-\alpha x}}.$$



tanh()



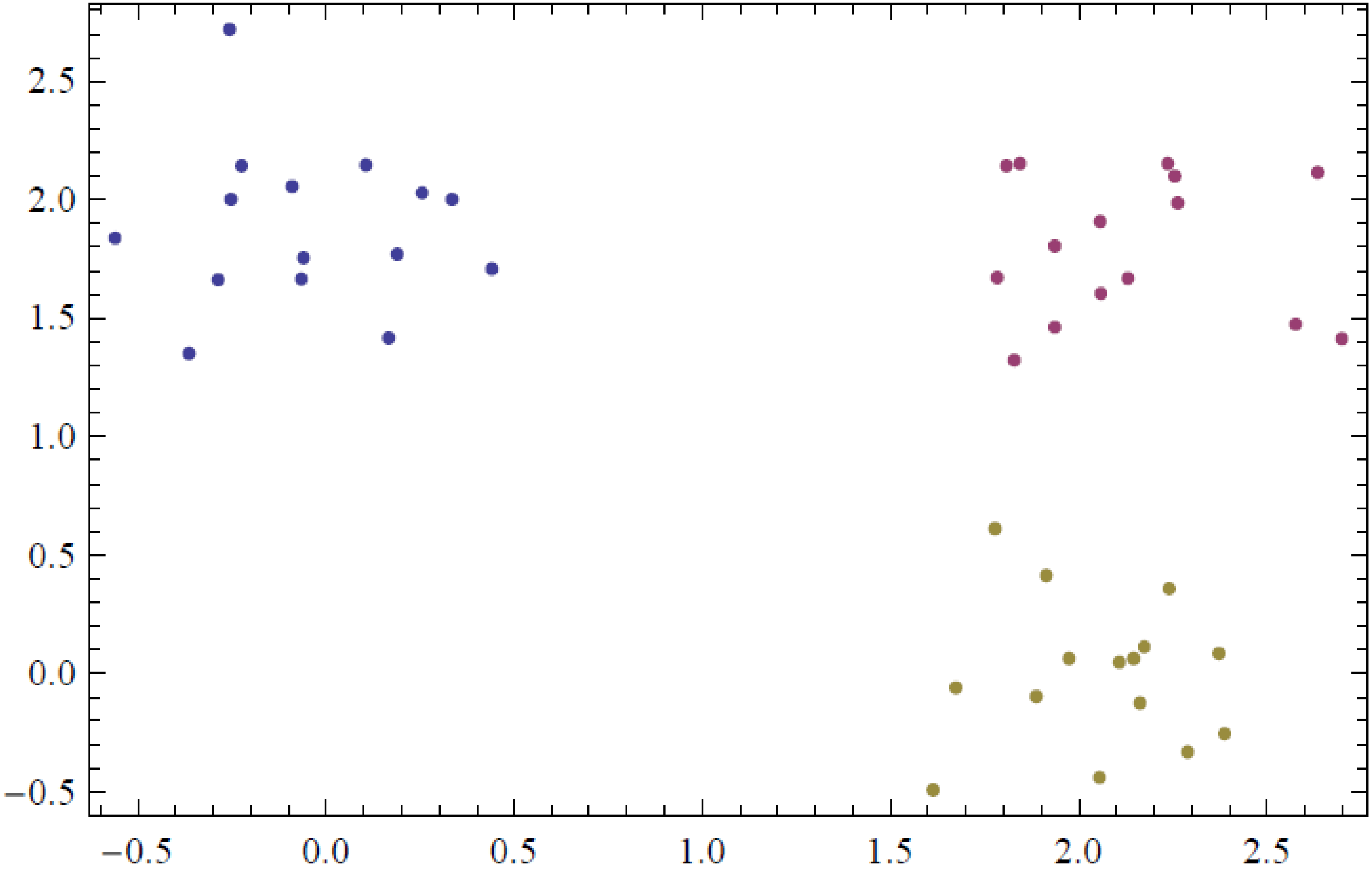
Relu



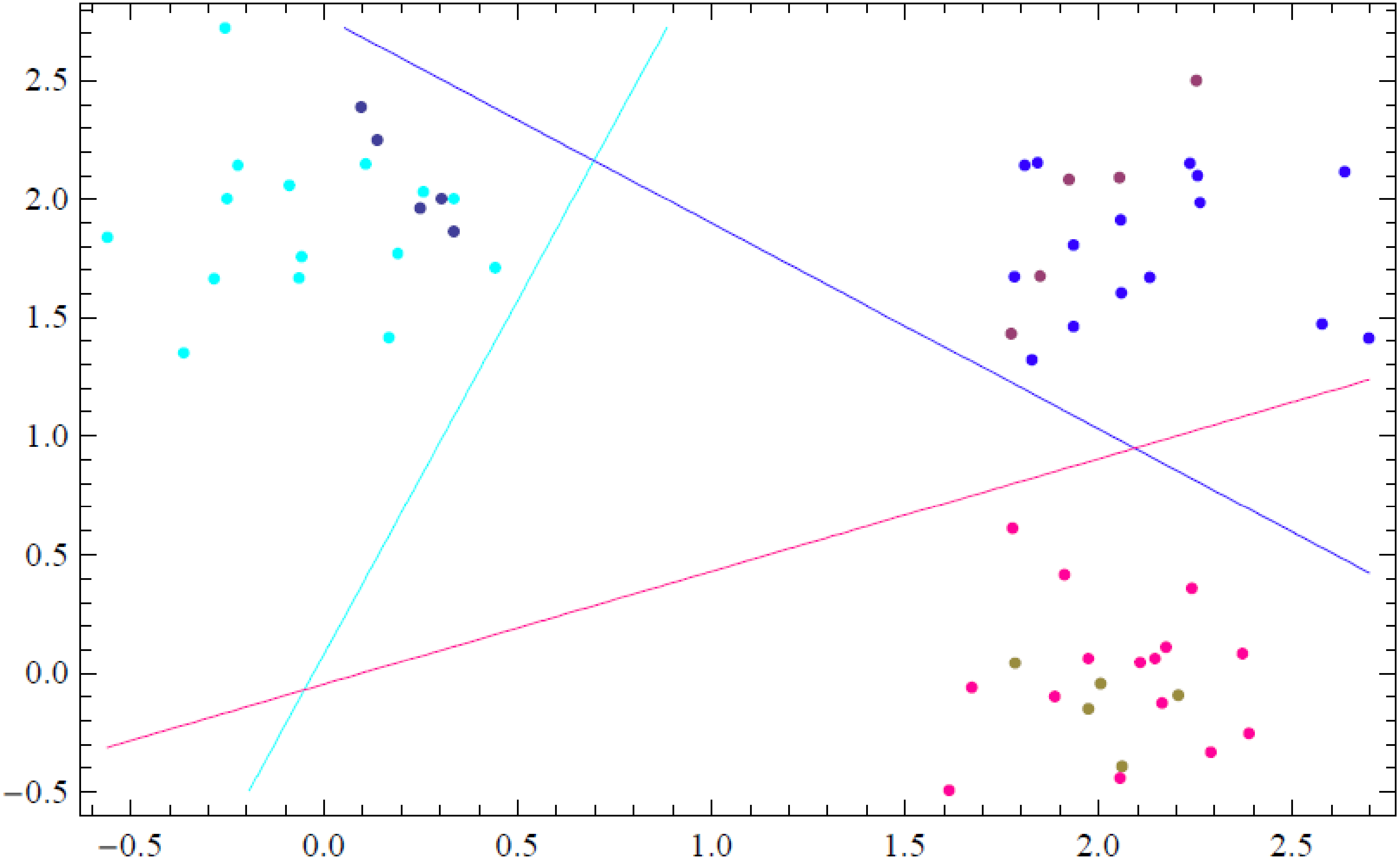
Mesterséges neurális hálózatok:

Tipikus neurális hálóval megoldható feladatok

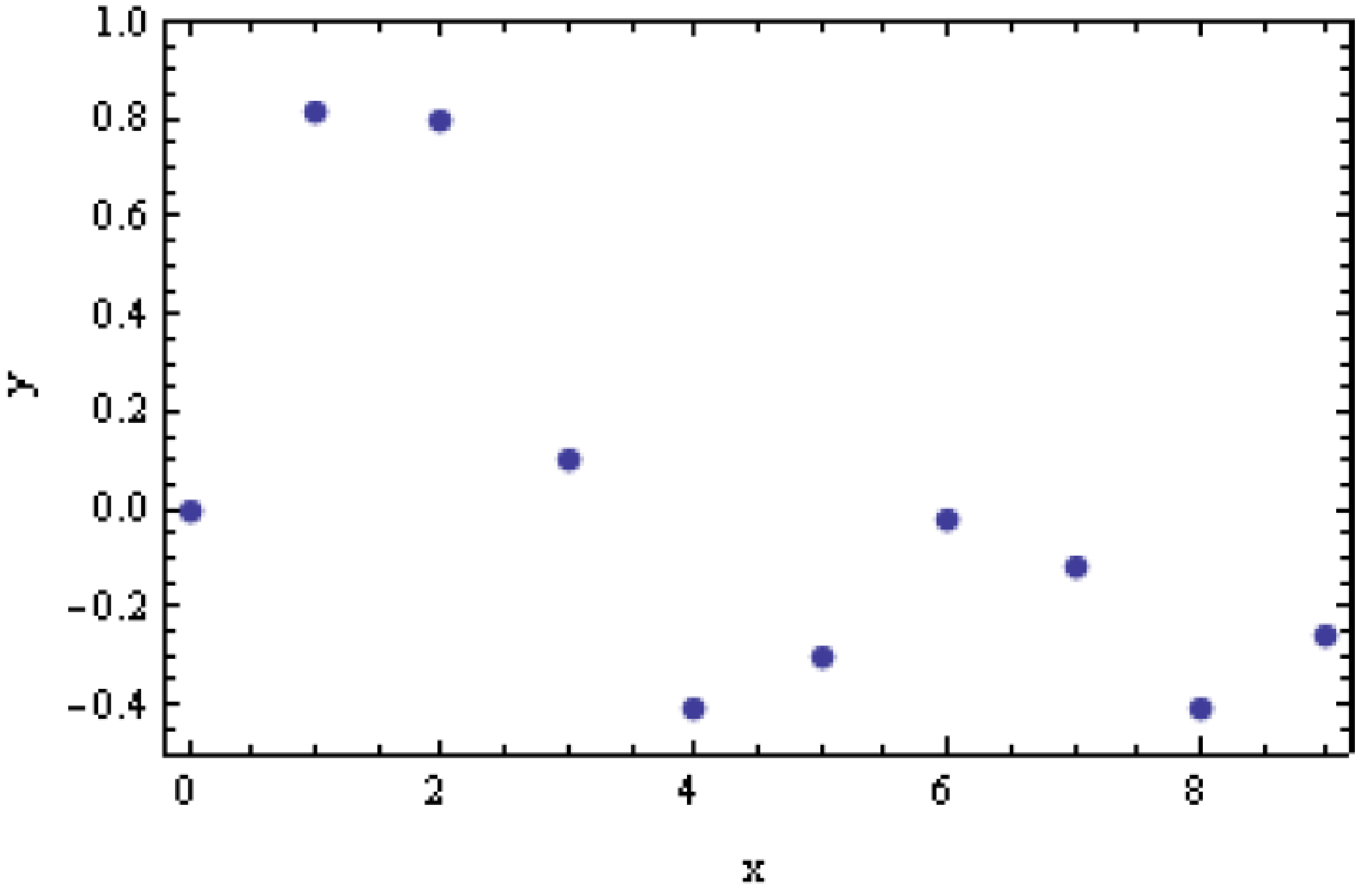
Osztályozás:
adatok osztályokba sorolása



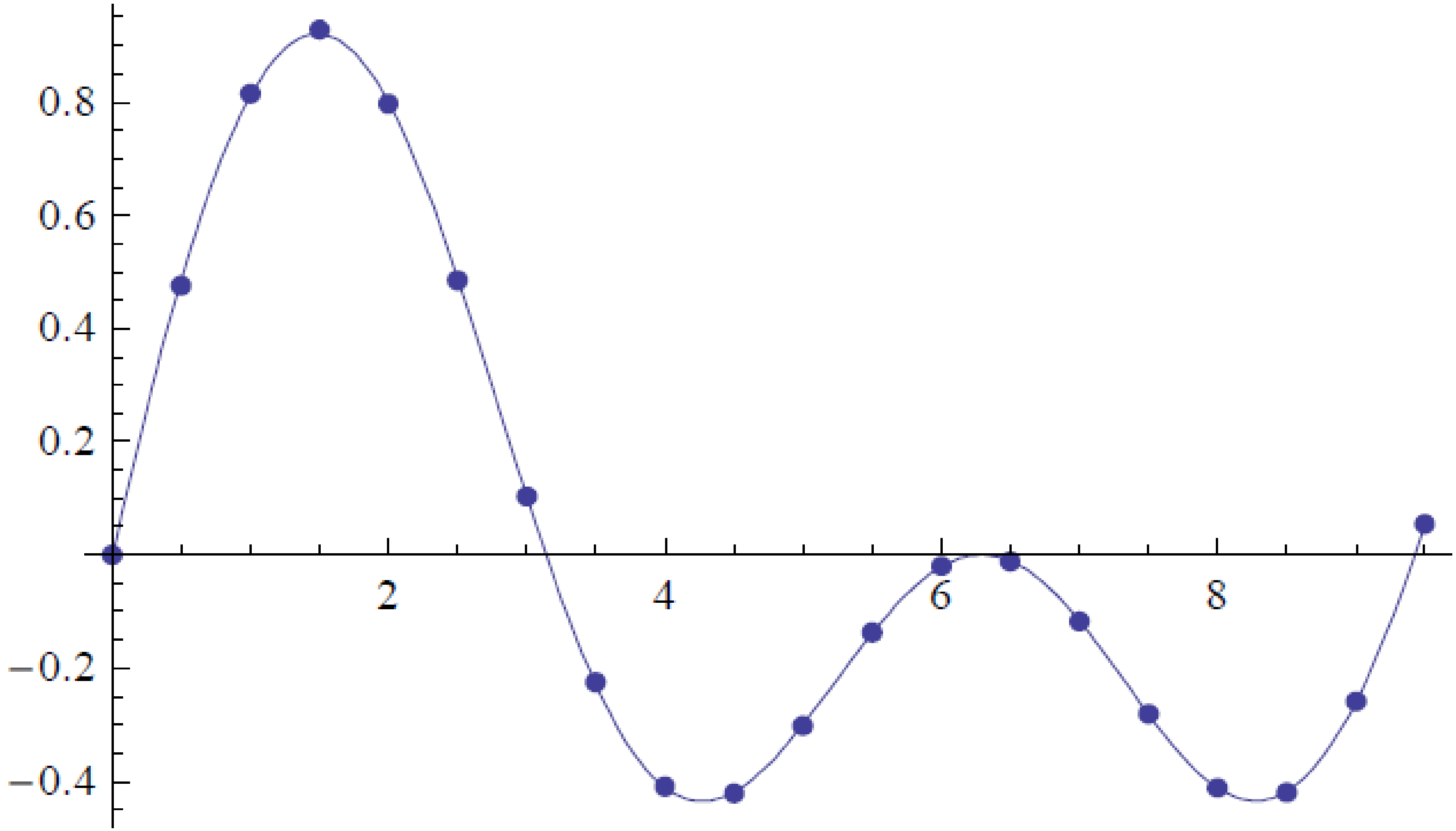
Osztályozás:
adatok osztályokba sorolása



Függvényközelítés



Függvényközelítés

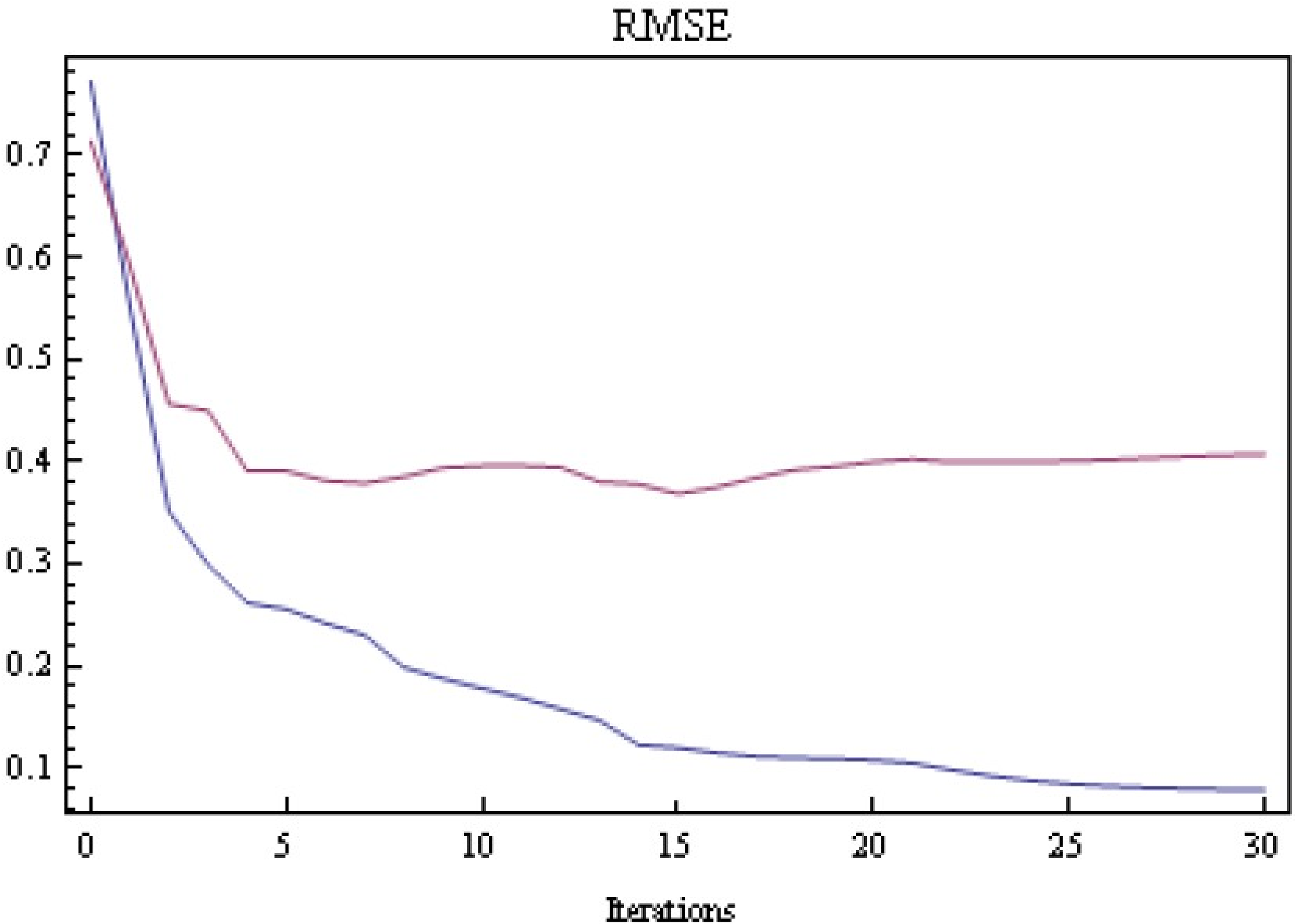


Mesterséges neurális hálózatok: **Hálózat tanítása**

Neurális hálózat tanítása

- Tanítás: **a csomópontokat összekötő súlyok meghatározása**
  - Nagyon gyakran **iteratív** folyamat
  - Cél: teljesüljön a **kívánt bemenet/kimenet leképezés**
  - A tanításhoz **tanító mintahalmazt** használunk:
    - **Ismert** input-output adat-párok
    - Számuk **lényegesen nagyobb**, mint a súlyok száma
    - Tanítás ~ többváltozós **hibafüggvény** minimalizálása
  - **Hibafüggvény:** az ismert bemenetekre az aktuális hálózat által adott válaszok és az elvárt kimenetek közötti eltérés kvantitatív jellemzése:
    - Leggyakrabban alkalmazott **négyzetes hibafüggvény**:
      - a hálózat által adott és az ismert (helyes) kimenetek közötti értékek négyzetösszege
  - Tanítás elsődleges célja: a **hibafüggvény minimalizálása**

Hibafüggvény változása a tanító és a validációs halmazon - példa



Hálózat tanításának jellemzése

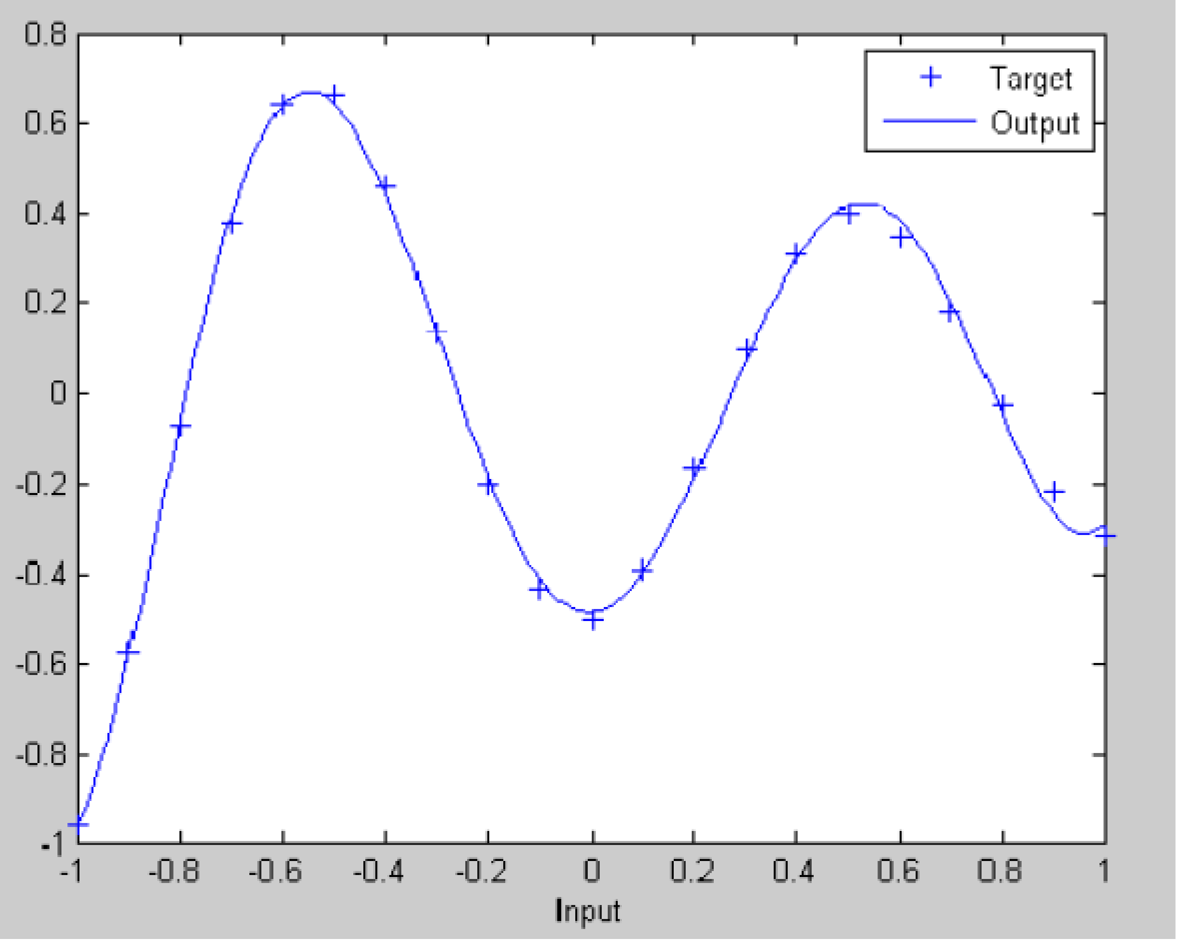
- Hálózat **általánosító képessége**
  - Tanulásban **részt nem vett** bemenetekre milyen „mértékben” ad helyes kimenetet
  - Gyakorlati **mérése** (becslése): bemeneti mintahalmaz felosztása – hiba mértéke a **tanításban részt nem vett** bemeneti minták esetén
- Tanítás lehetséges gyakori hibái
  - **Túltanulás**: a hálózat hibája ugyan csökken a tanítás során, de a hálózat „megtanulja” a tanító halmaz elemeit
  - **Alultanulás**: a hálózat által biztosított leképzés hibája további tanulással csökkenthető

Mesterséges neurális hálózatok:
Hálózat tanításának általános problémái

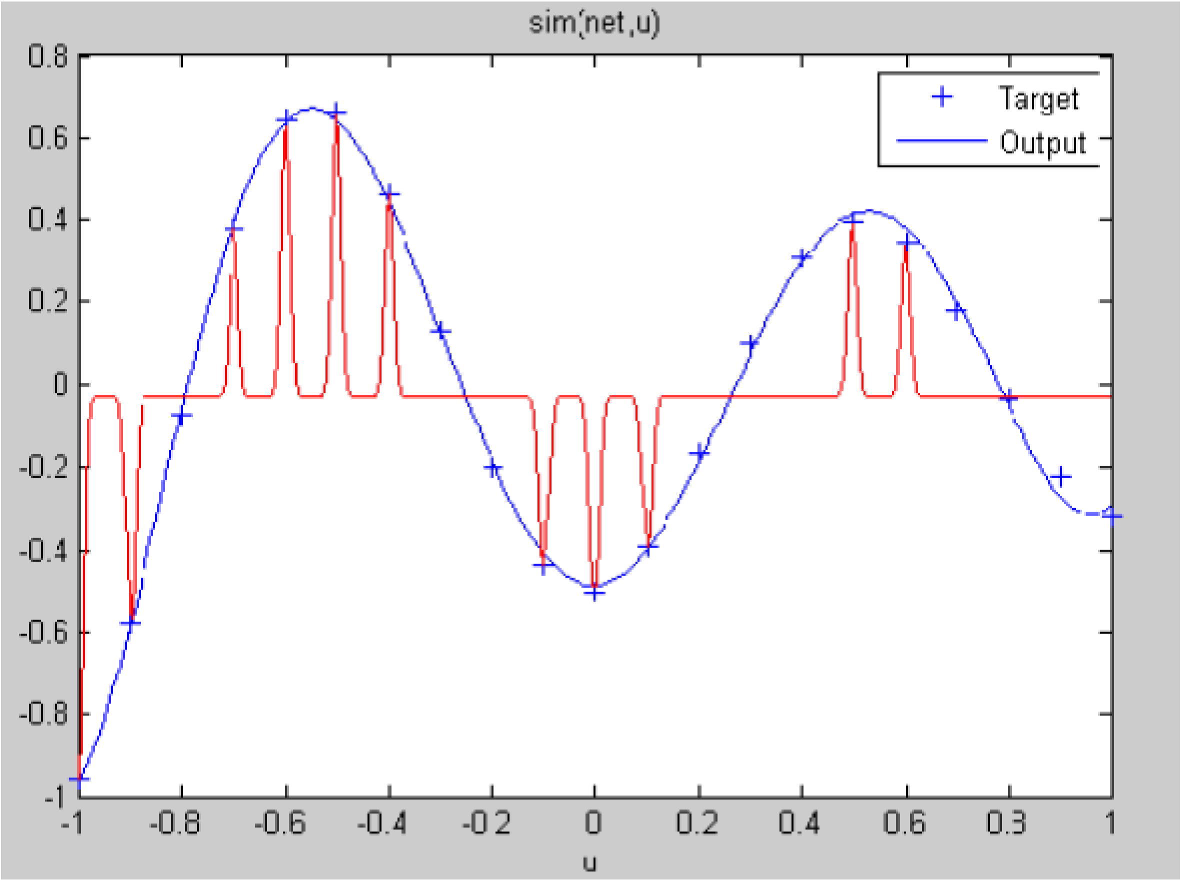
Hálózat tanításának jellemzése

- Hálózat **általánosító képessége**
  - Tanulásban **részt nem vett** bemenetekre milyen „mértékben” ad helyes kimenetet
- Tanítás lehetséges gyakori hibái
  - **Túltanulás**: a hálózat hibája csökken, így látszólag nő az általánosító képesség, de a hálózat „megtanulja” a tanító halmaz elemeire adandó választ, vagyis az általánosító képesség növekedése csak látszólagos
  - **Alultanulás**: a hálózat által biztosított leképzés hibája további tanulással csökkenthető

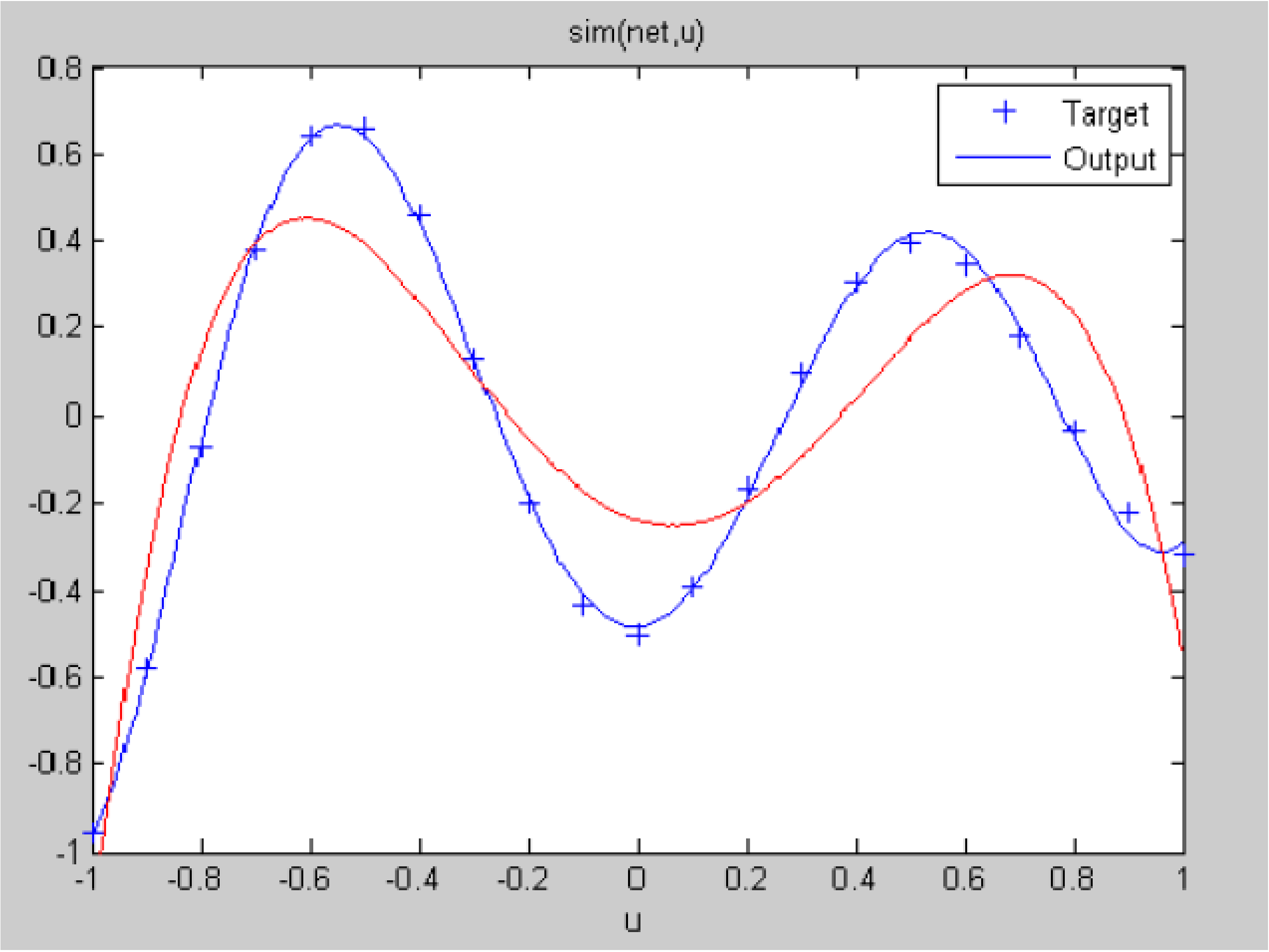
Közelítendő függvény



„Túltanulás” esete



„Alultanulás” esete



Megfelelő tanulás biztosítása: módszerek I.

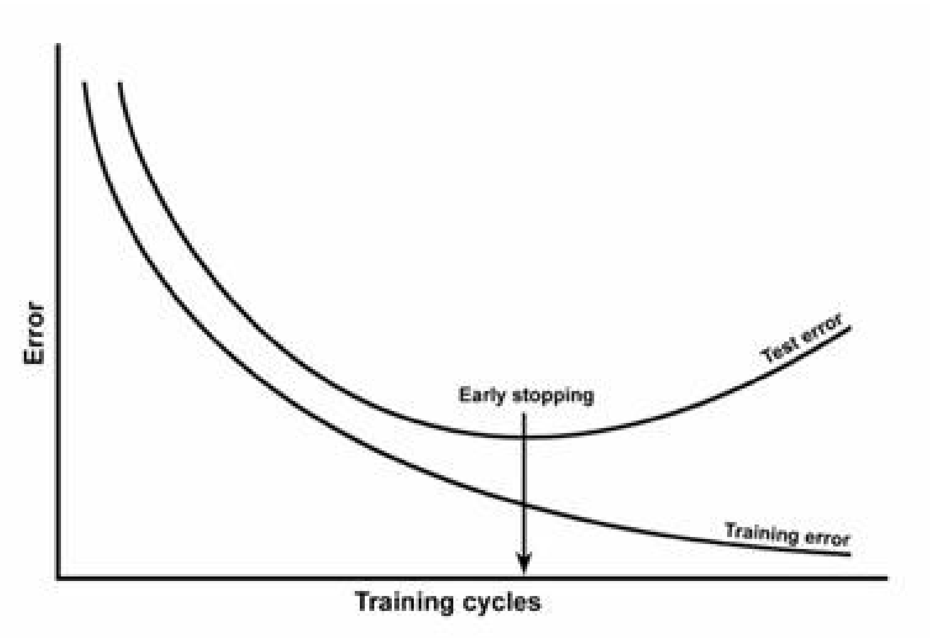
A) Alul-, ill. túltanulás elkerülése **megfelelő hálózati topológia** választásával:

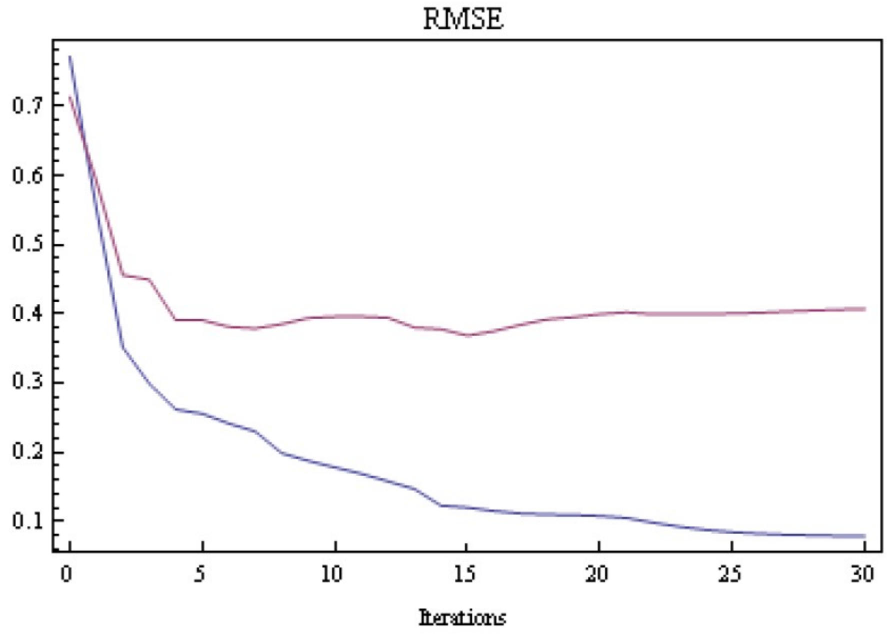
- megfelelően választott rejtett rétegbeli csomópont-szám;
- tanulás után validáció.

B) Korai leállás módszere

- **tanuló-** és egy **validációs** halmaz,
- addig tanítunk, amíg a validációs halmazon **is csökken** a hiba.

Korai leállás módszere: hiba a tanító és a validációs halmazon





Megfelelő tanulás biztosítása: módszerek II.

C) Regularizáció a túltanulás elkerülésére

- Túltanulás esetén a leképzés gradiense általában nagy
- A hibafüggvény megváltoztatása
  - **Cél 1)** hálózat **hibájának** csökkentése

$$R(w)=\sum_{j=1}^{n}\left(y_j-\sigma\left(w^T x_j+b\right)\right)^2$$

  - **Cél 2)** hálózat által megvalósított függvény **gradiensének minimalizálása**

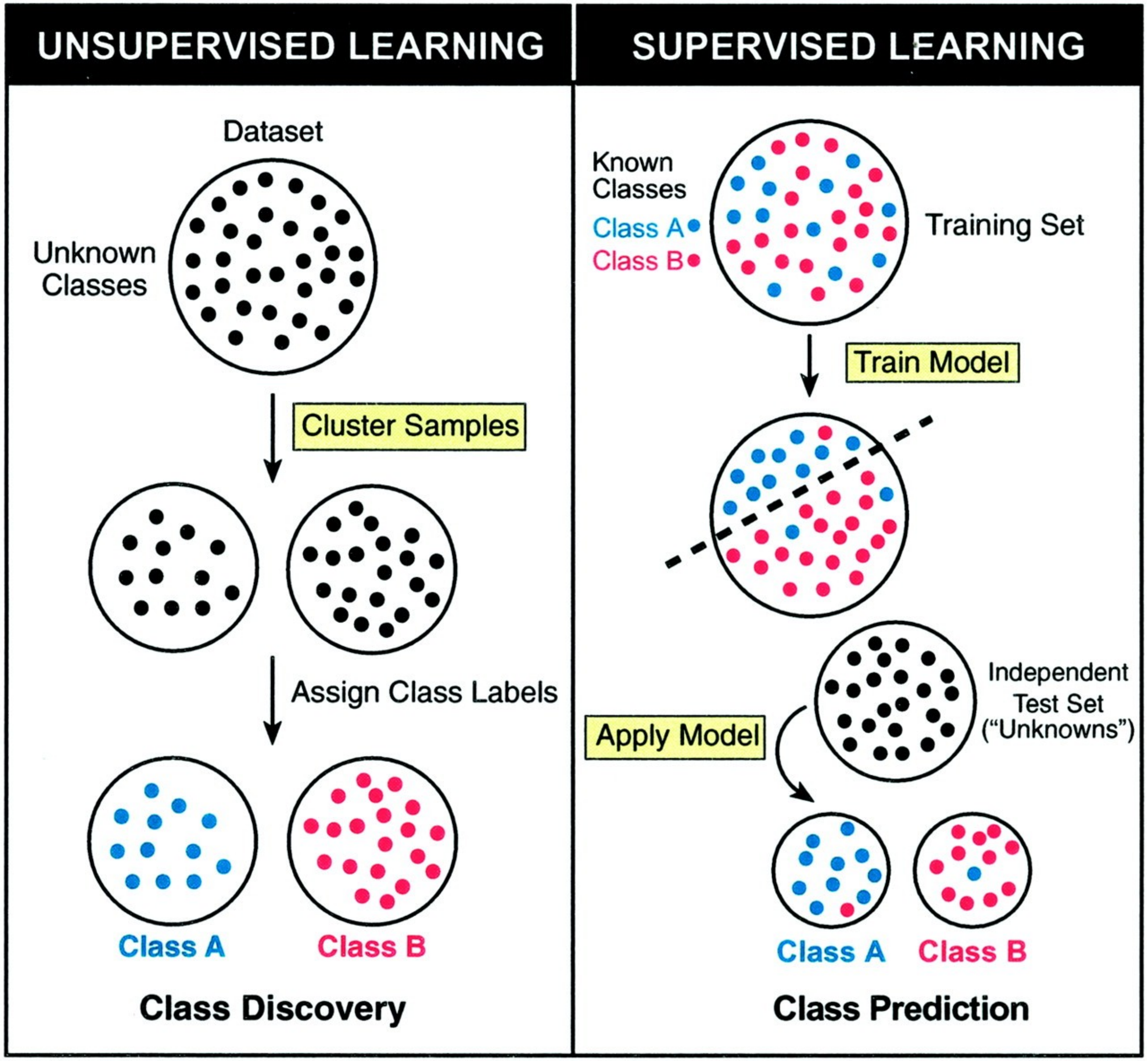
$$R(w)=\sum_{j=1}^{n}\left(y_j-\sigma\left(w^T x_j+b\right)\right)^2+\delta_w w^T w$$

Mesterséges neurális hálózatok:
Hálózatok tanításának típusai

Hálózatok tanításának típusai

- Tanítás módszerének típusa:
  - **Felügyelt tanítás**
    - Input-output adatpárok használata a súlyok meghatározására a tanítás során
    - Jellemző megoldandó feladattípus: **függvény közelítés, adat-osztályozás**
    - Hibafüggvény: az input-output adatpárok alapján számoljuk
  - **Felügyelet nélküli tanítás**
    - Csak a bemeneti (input) adatok használata a súlyok meghatározására a tanítás során
    - Jellemző megoldandó feladattípus: **adat-klasszifikáció**
    - Hibafüggvény: az eredményre vonatkozó valamilyen a priori ismeretek alapján a kimeneti leképzés, hálózati súlyok stb. alapján számoljuk
      - pl. az osztályozás „jósága” alapján

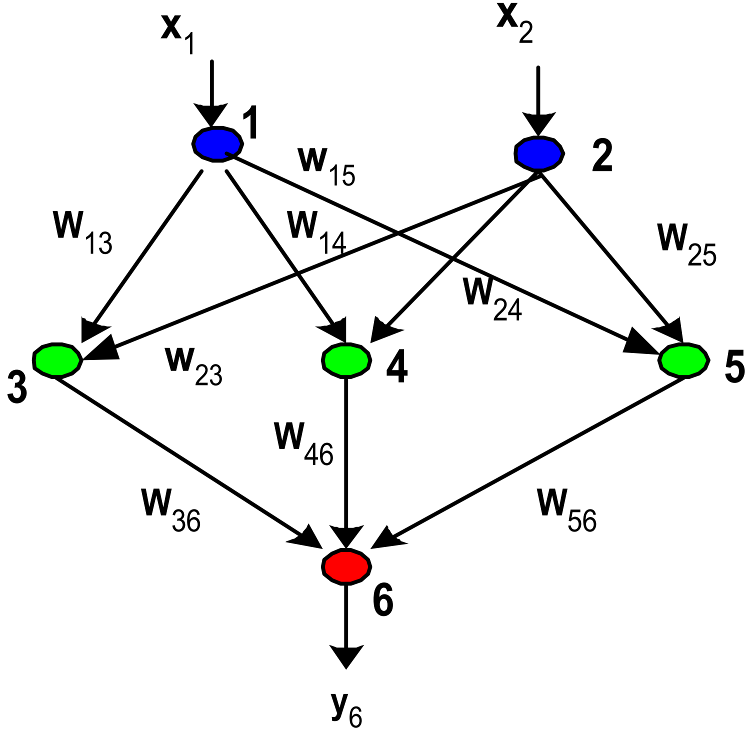
Felügyelt és felügyelet nélküli tanítás osztályozási feladat esetén



Mesterséges neurális hálózatok:
Hálózatok szimulációja

Neurális hálózatok szimulációja

- **Hálózatok szimulációja:**
  - Input-output leképzés megadása különböző bemenetek esetén



$$\begin{pmatrix} x_3 \\ x_4 \\ x_5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} w_{13} & w_{23} \\ w_{14} & w_{24} \\ w_{15} & w_{25} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$$

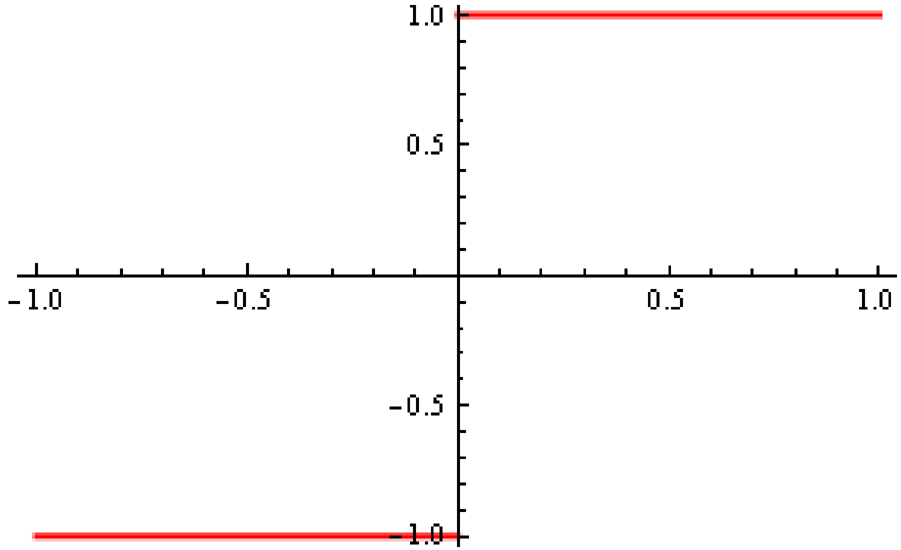
$$x_6 = \begin{pmatrix} w_{36} & w_{46} & w_{56} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f(x_3) \\ f(x_4) \\ f(x_5) \end{pmatrix}$$

$$y_6 = f(x_6)$$

Mesterséges neurális hálózatok:
Perceptron hálózat

Egyrétegű perceptron hálózat

- **Egyrétegű perceptron hálózat:**
  Rejtett réteg nélküli neurális hálózat
- Átviteli függvény:
  - **Signum függvény**
- Alkalmazási terület:
  - Osztályozás, alakfelismerés
- Létezik bináris változata
  - 0,1 leképzés
  - Egyszerűbb tanítás
- Csak **lineárisan szeparábilis** problémák megoldására alkalmazható (l. később)
- Rosenblatt (1962)

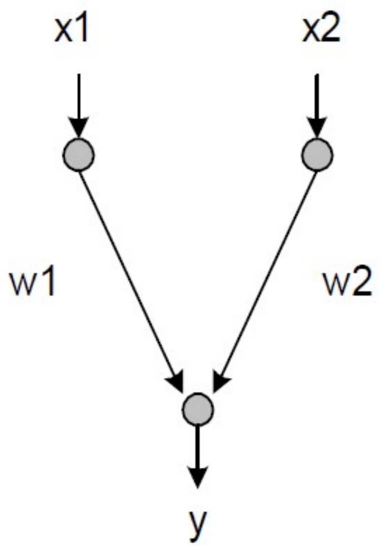


A eltolás (bias) alkalmazása a küszöbérték helyett

- Példa:
  - AND logikai függvény megvalósítása
  - **X1**, **x2** bemenetek; **w1**, **w2**, súlyok; $\boldsymbol{\tau}$ eltolás

A eltolás (bias) alkalmazása a küszöbérték helyett

- Példa:
  - AND logikai függvény megvalósítása
  - **x1**,**x2** bemenetek; **w1**, **w2**, súlyok; **τ** eltolás

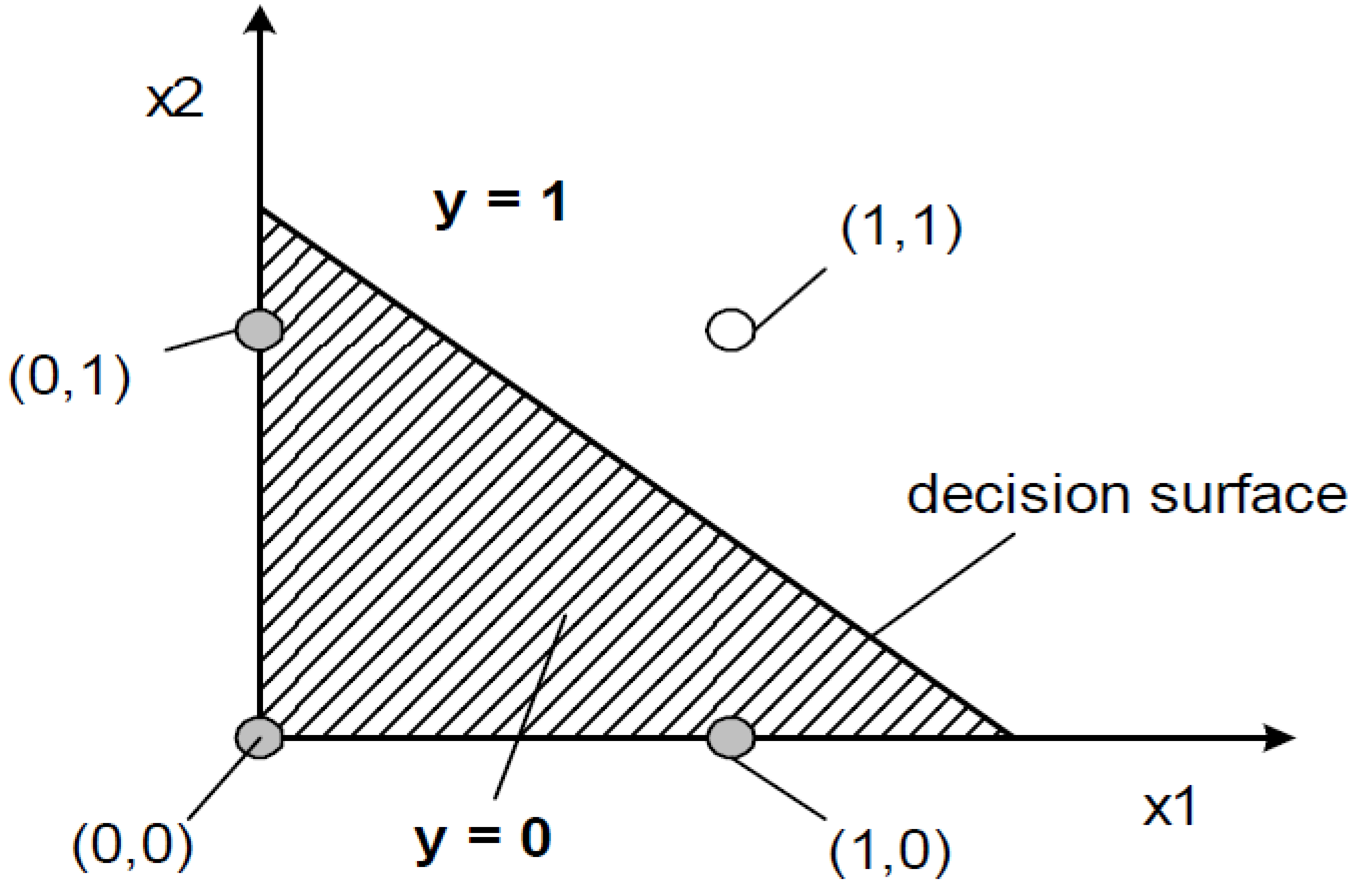


Az AND függvény input - output táblázata

x1	x2	y
0	0	0
0	1	0
1	0	0
1	1	1

$$y(x1,x2) = f\,(w1\ x1 + w2\ x2 - \tau)$$

AND döntési felülete



Tanítás és a döntési felület

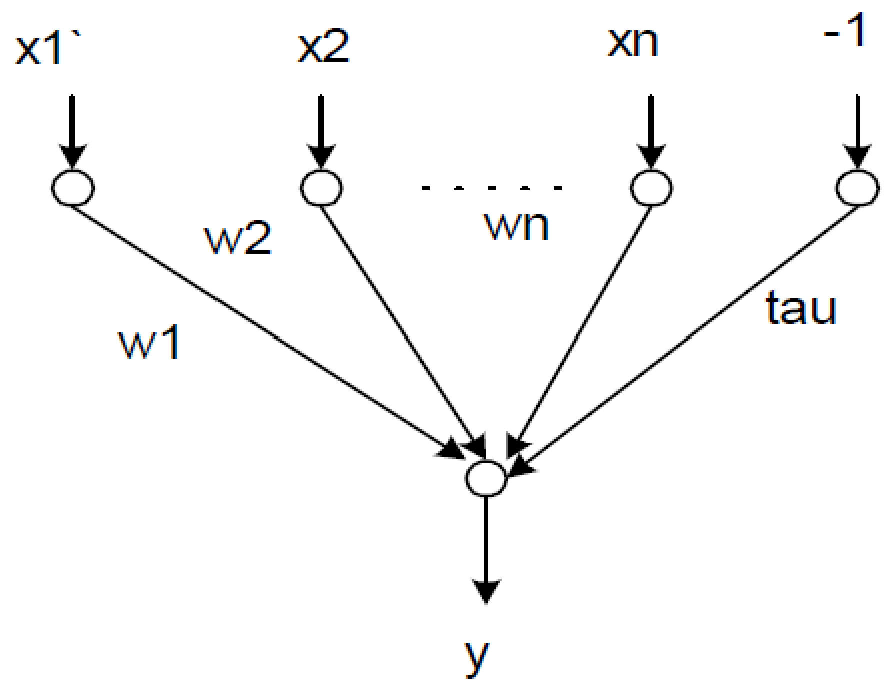
- **Döntési felület** osztályozási feladat esetén: az a felület, ami elválasztja a különböző kimenetet eredményező bemeneti értékeket tartalmazó **bemeneti tartományokat**
- Döntési felület az egyrétegű **perceptron hálózat** esetén egy **n-1 dimenziós felület**, ahol n a probléma bemeneti változóinak száma
- A **tanítás során** implicit módon **a döntési felületet határozzuk meg**, azt „mozgatjuk” a súlyok változtatásával

- **AND** esetén a döntési felület alapján a súlyok meghatározása:
  $x2 = -a \cdot x1 + b$ ← *döntési felület egyenlete*

  $0 = w2 \cdot x2 + w1 \cdot x1 - \tau$ ←*neurális háló itt „vált” (l. háló egyenlet+aktivációs fv.)*
  $x2 = -w1/w2 \cdot x1 + \tau/w2$
- Döntési felület paraméterei és a súlyok közötti összefüggések:
  $a = w1/w2$, $b = \tau/w2$ ←→ $w2=\tau/b$, $w1= \tau \cdot a/b$

Hálózat megvalósítása bias alkalmazásával

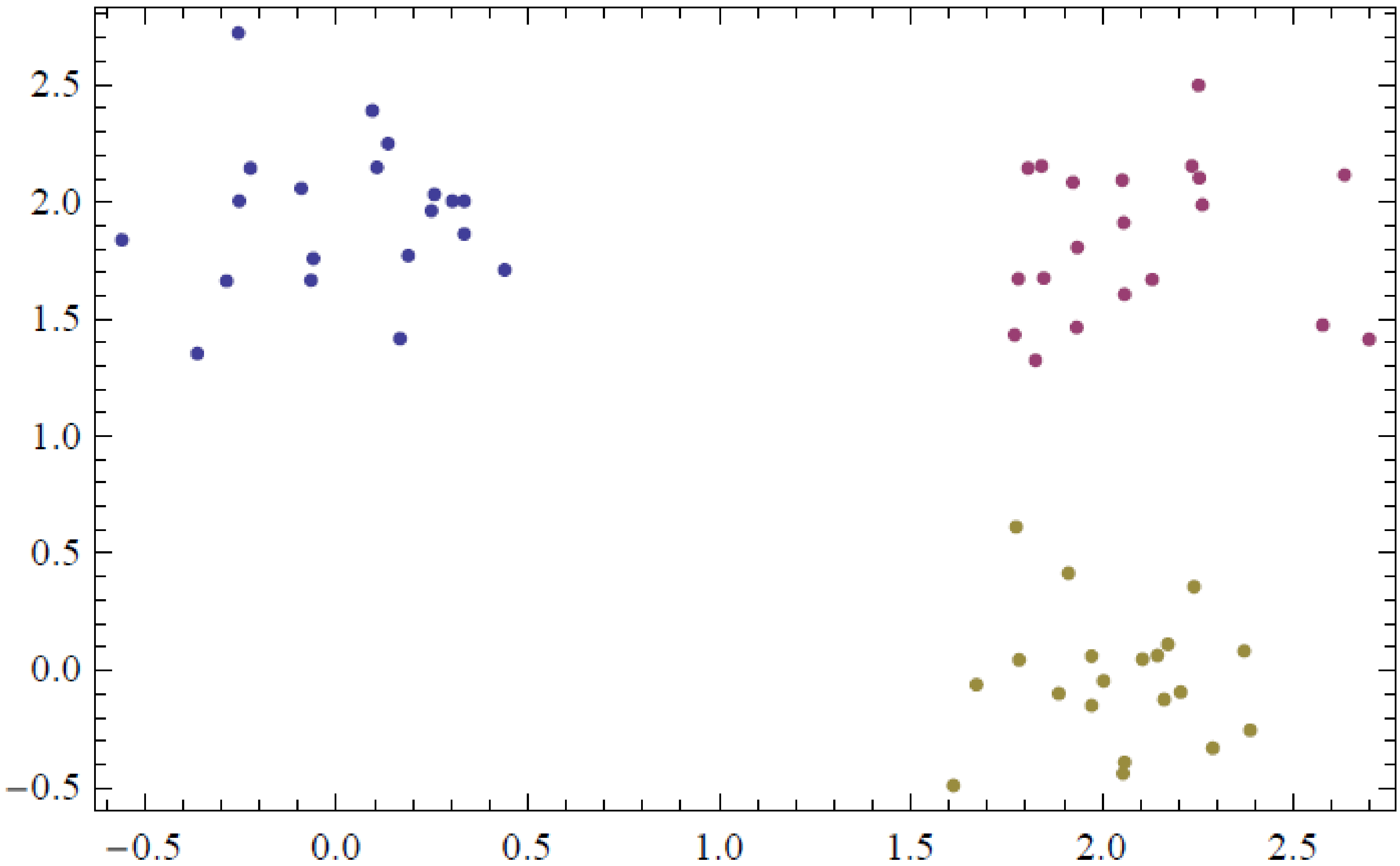
- Aktivációs függvény küszöbértéke: 0,
  az un. **bias („eltolás”) csomópont** súlyával (τ) állítható a küszöbérték



Perceptron hálózat: példa

- Van három csoportba sorolható ponthalmazom a kétdimenziós térben:
  - Koordináták: X1, X2

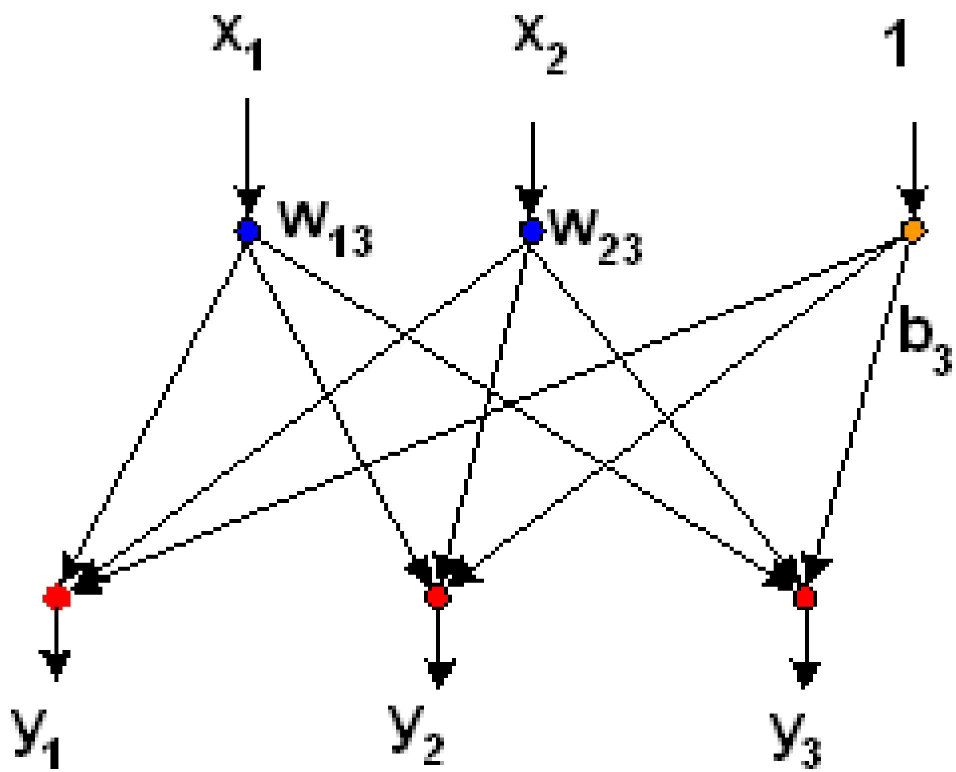
Perceptron hálózat: input pont halmaz



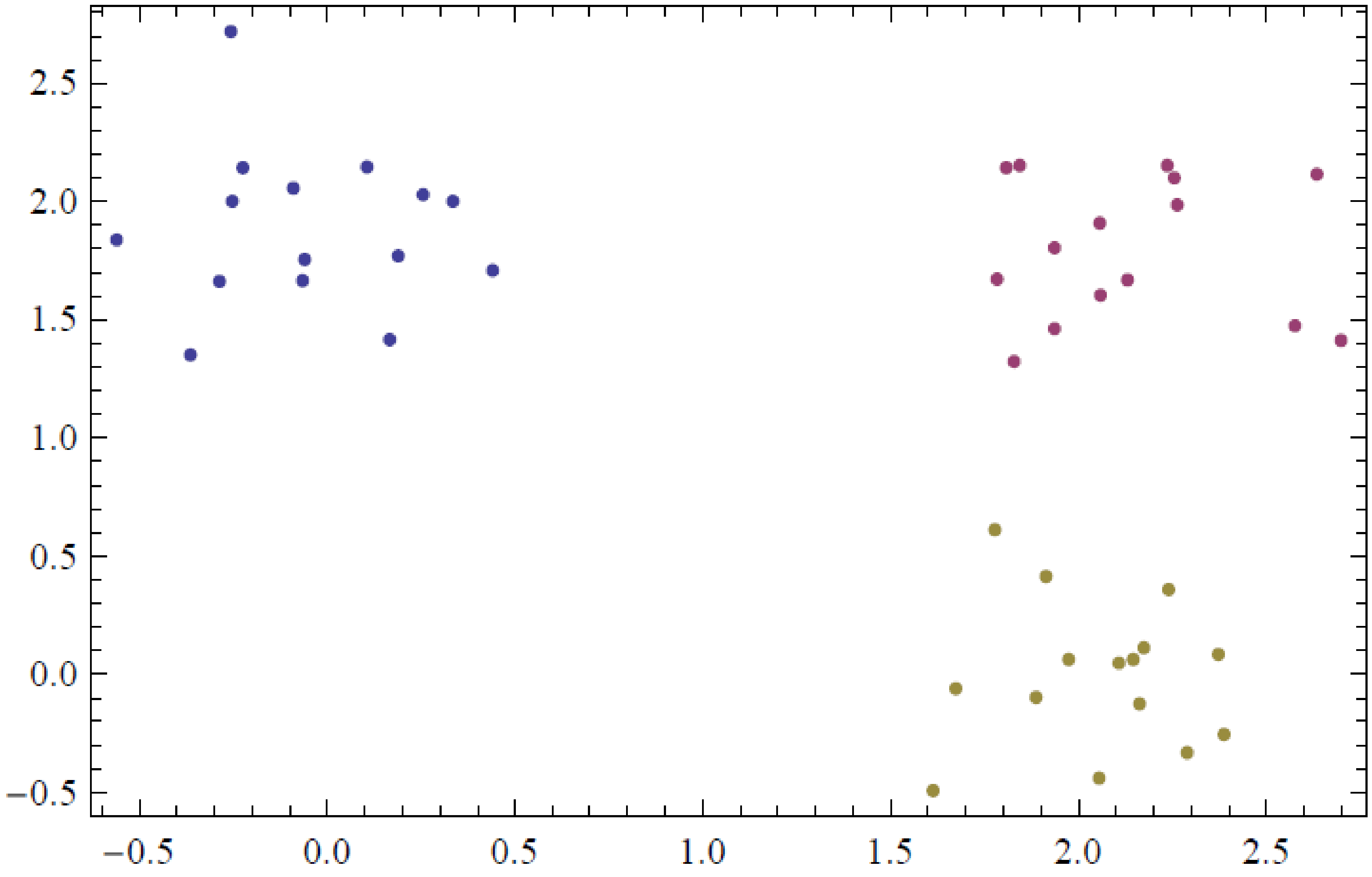
Perceptron hálózat: példa

- Van három csoportba sorolható ponthalmazom a kétdimenziós térben:
  - Koordináták: X1, X2
- A hálózat **kimeneteit** az egyes **csomópontokhoz** rendeljük:
  - A csoporthoz rendelt kimeneten az 1 érték jelezze az adott kimenethez tartozó pontot
  - Kimenetek: y1, y2, y3
- Perceptron hálózat: nincs rejtett réteg

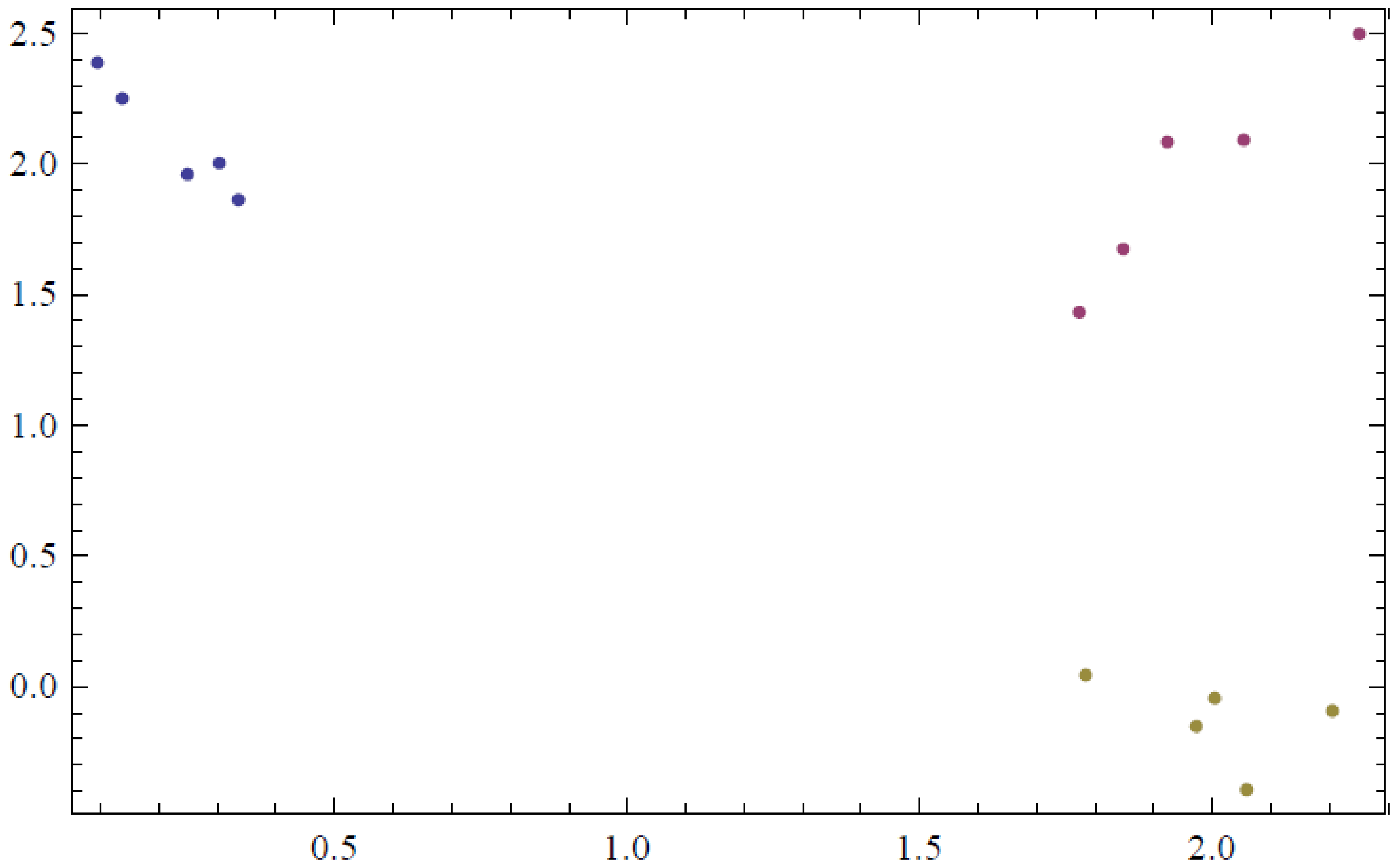
Perceptron hálózat: hálózati topológia



Perceptron hálózat: tanító halmaz



Perceptron hálózat: validációs halmaz



Perceptron hálózat tanítása

- **Tanuló** halmaz:
  - ***m*** darab **{*x*$^{(k)}$, *d*$^{(k)}$}**, **k = 1, 2,…,m** input-output pár
  - ***x***$^{(k)}$, ***d***$^{(k)}$ vektorok
  - ***x***$^{(k)}$ k-adik inputhoz a ***d***$^{(k)}$ output tartozik
- Feltesszük, hogy **m > n**,
  ekkor a következő egyenlet **túlhatározott**:
  (***m*** egyenlet, ***n*** ismeretlen)

$$d^{(k)} = sign\left(\sum_{i=1}^{n} x_i^{(k)} w_i\right) \quad k = 1,2,\ldots,m$$

Tanítás lépései

1) Kezdeti súlyok adása: pl. véletlen súlyok [0,1] (**w(n):=rand();**)
   k:=1 *(*k: *lépés szám)*

2) $\mathbf{x}^{(k)} \rightarrow \mathbf{y}^{(k)}$ kiszámítása (k-dik bemenetre adott válasz a w(n) alapján)

3) Ha $\mathbf{y}^{(k)}$ **=!** $\mathbf{d}^{(k)} \rightarrow$ **w(n+1) = w(n) +** $\boldsymbol{\Delta}$**w**

   $\boldsymbol{\Delta w = \nu \cdot d^{(k)} \cdot x^{(k)}}$, $\boldsymbol{0 < \nu < 1}$

   ($\boldsymbol{\nu}$*: tanulási paraméter,* $\mathbf{d}^{(k)}$*={-1;+1}, a súlyokat az* $x^{(k)}$ *irányába mozgatjuk)*

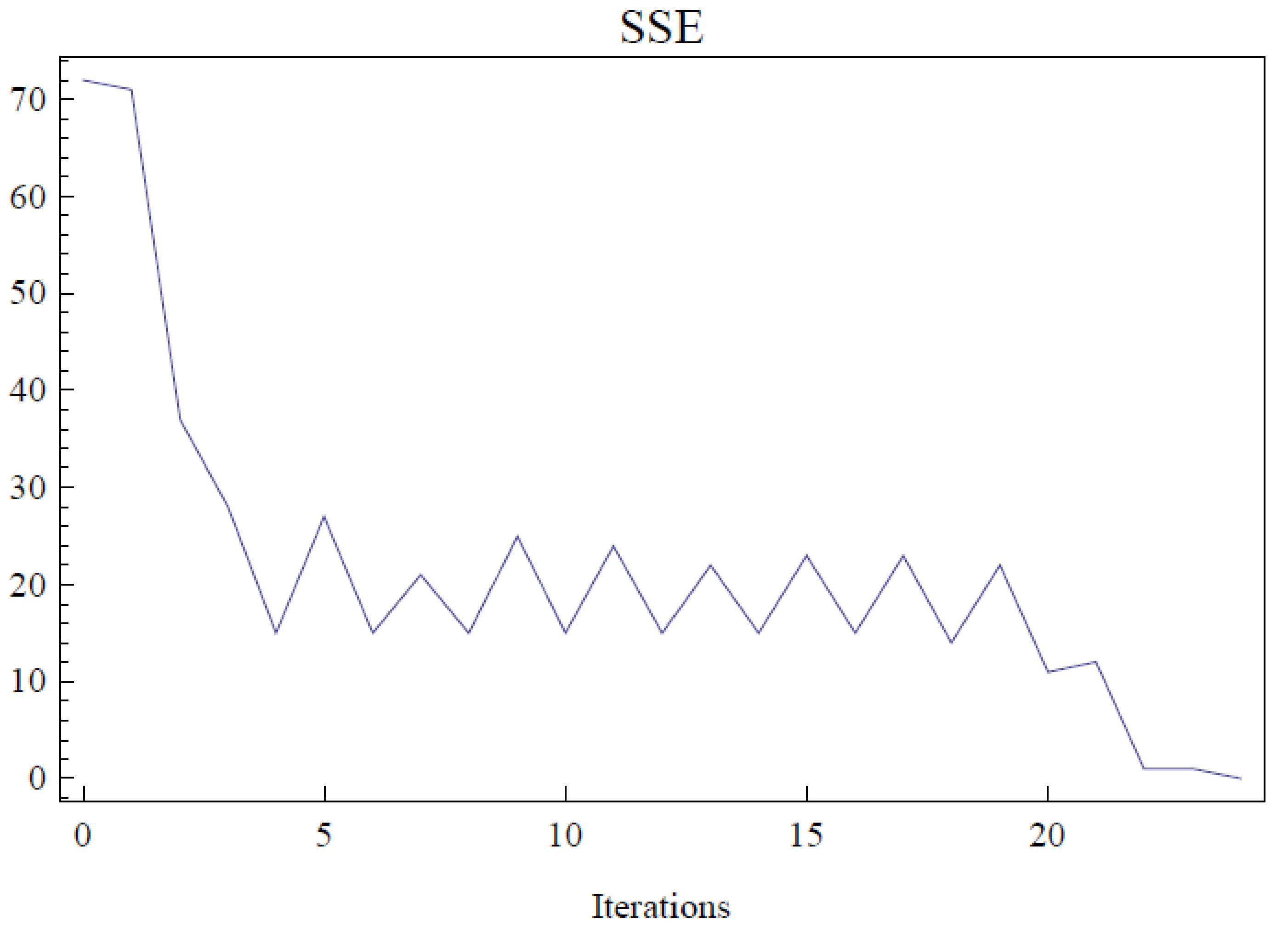
   Ha $\mathbf{y}^{(k)} = \mathbf{d}^{(k)} \rightarrow$ **w(n+1) = w(n)**

4) **k:=k+1,** GOTO 2) (egymás után vesszük a bemenet/kimenet párokat)

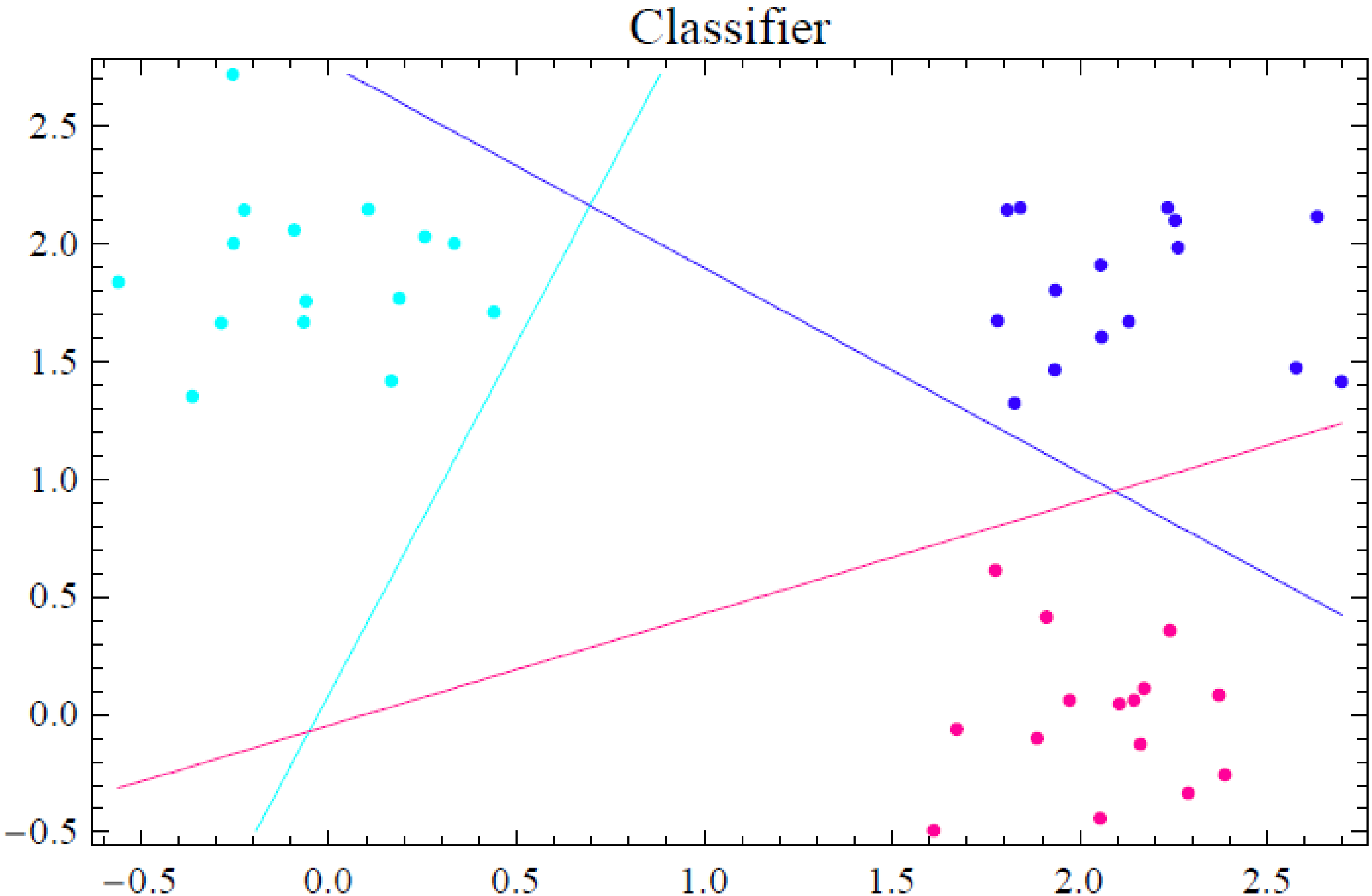
   Megállási feltétel: egyik input esetén sem kellett a súlyokat változtatni!

   (*Rosenblatt és Novikoff tétel: változtatások száma korlátos → véges lépés)*

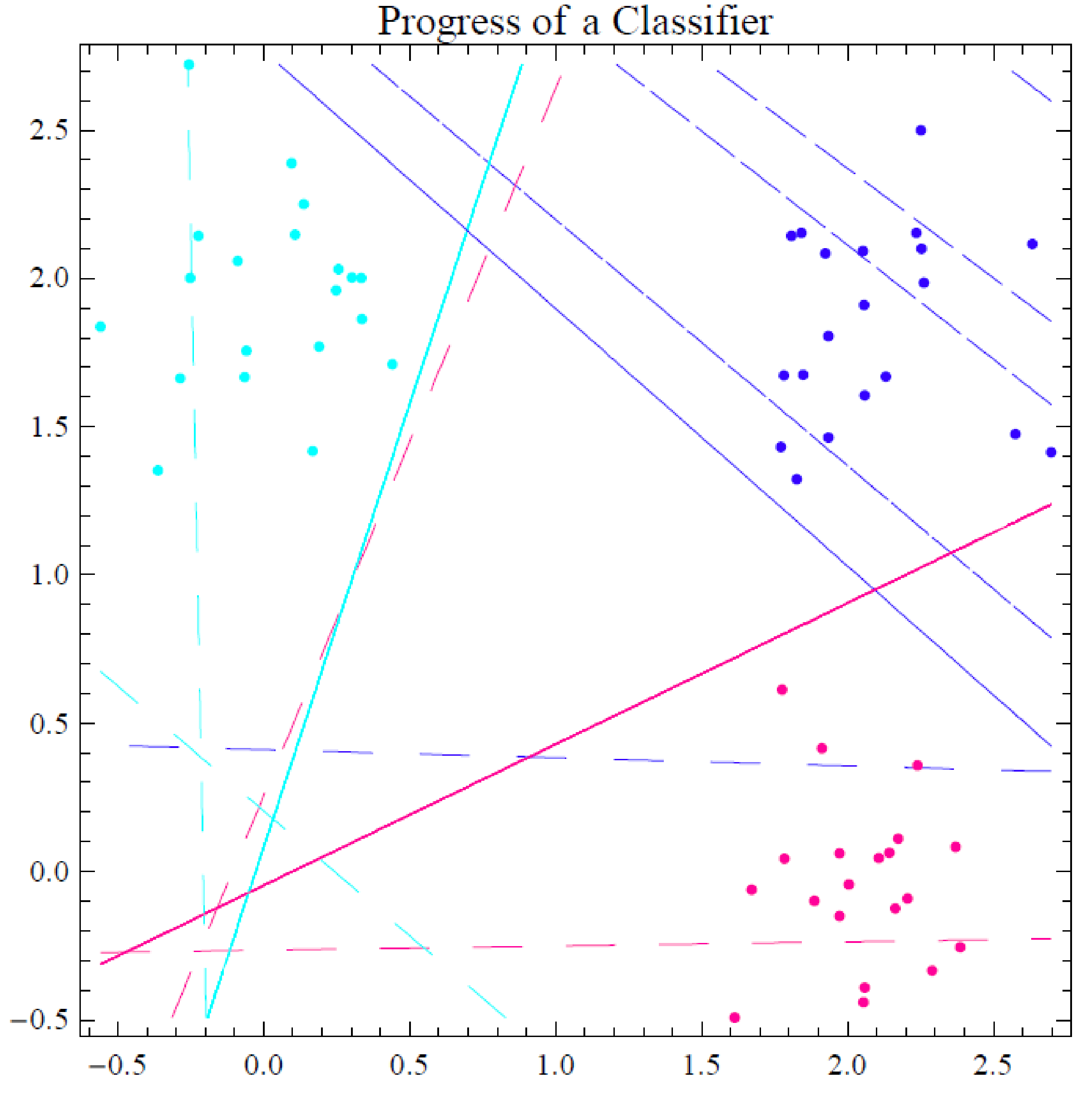
Iteratív tanítás: hibafüggvény változása iterációnként



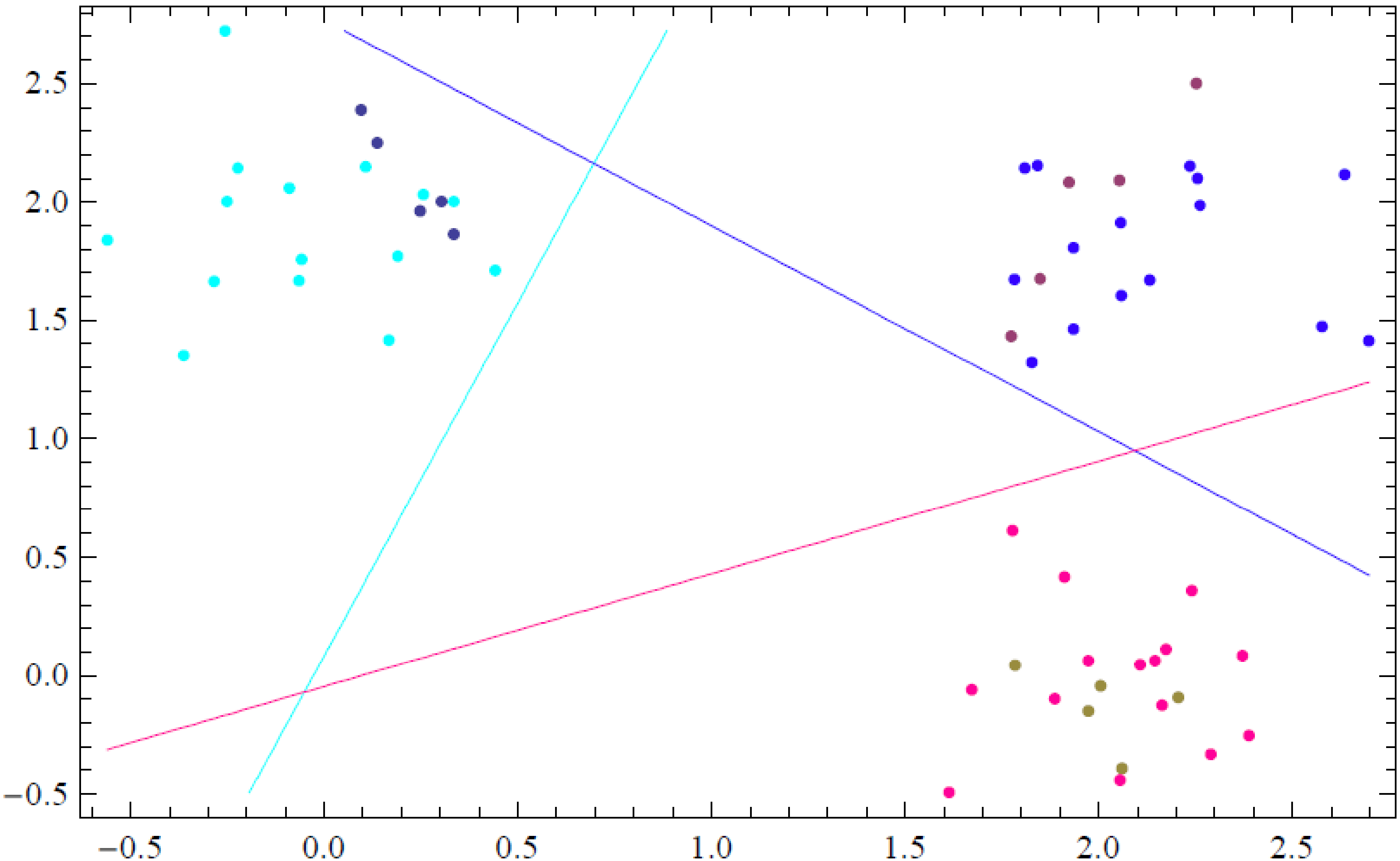
Az eredményül kapott vágási síkok



Vágási síkok változása az iterációk során



Tanító és validációs pontok a vágási síkokkal

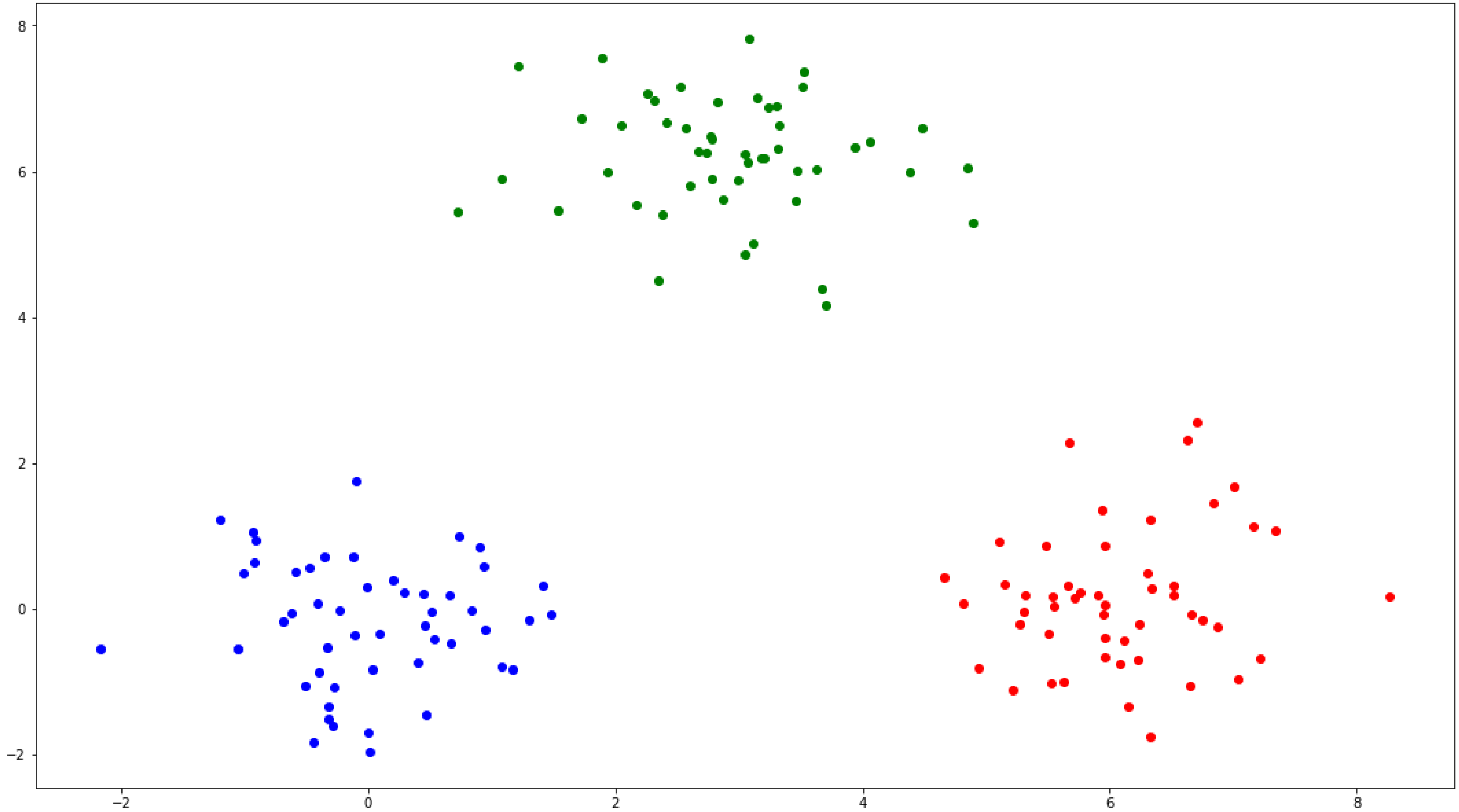


Perceptron hálózat értékelése

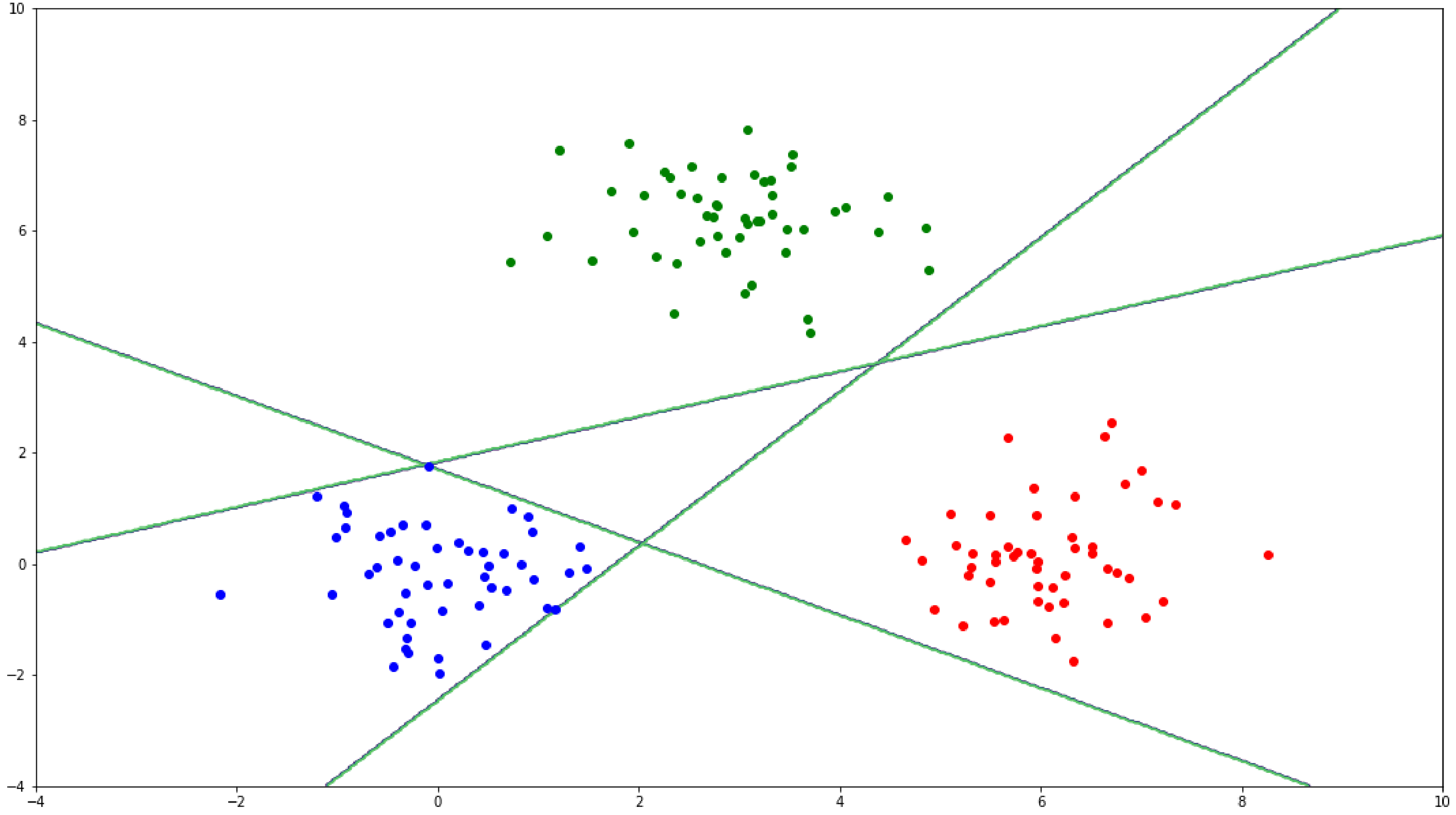
- **Sikeres** osztályozás:
  - Jól definiált tartományok az egyes osztályokhoz
- **Hátrány**: A paraméter térben (síkon) bizonyos tartományok **nem tartoznak egyértelműen** a megkülönböztetett osztályokhoz
- Csak **lineárisan szeparábilis** (szeparálható) problémák megoldására alkalmazható

Mesterséges neurális hálózatok:
Perceptron hálózat demó

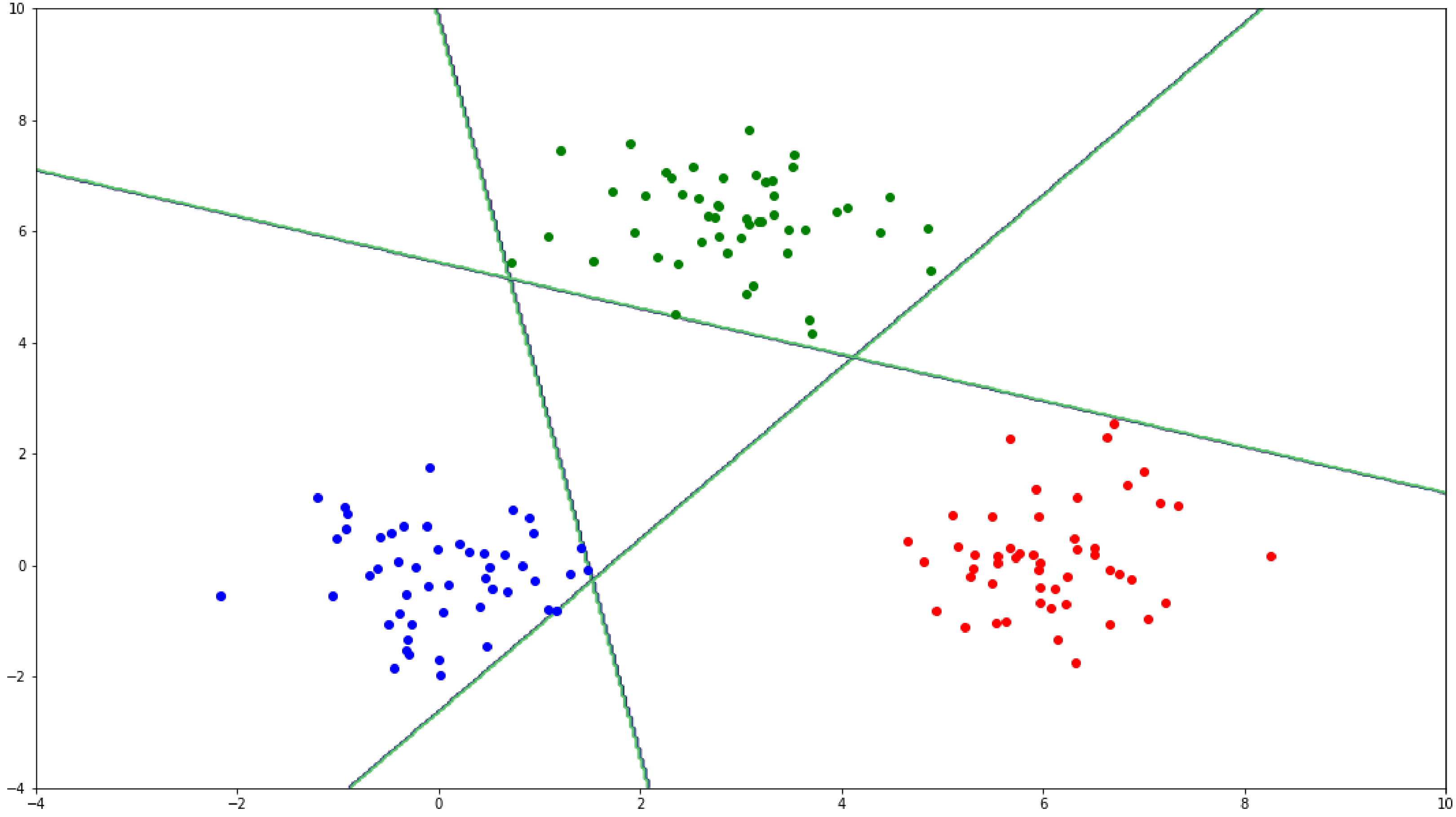
Perceptron példa három osztályra: bemeneti adathalmaz



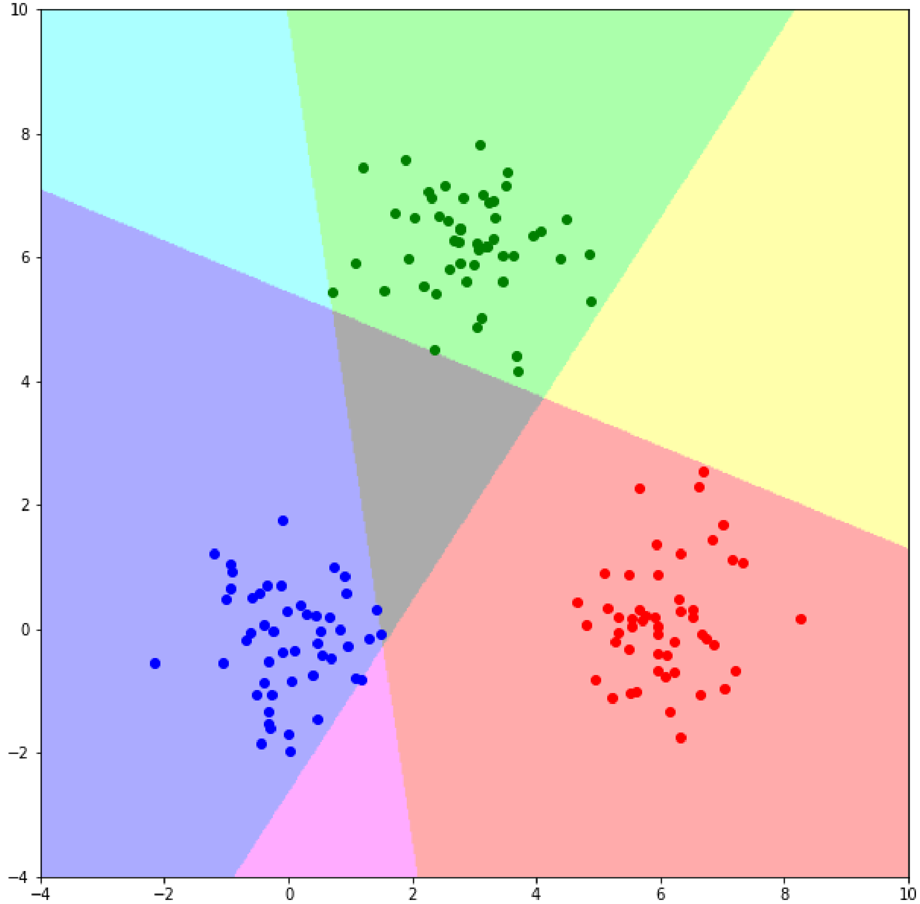
Perceptron példa három osztályra: eredmény - szeparációs hipersíkok



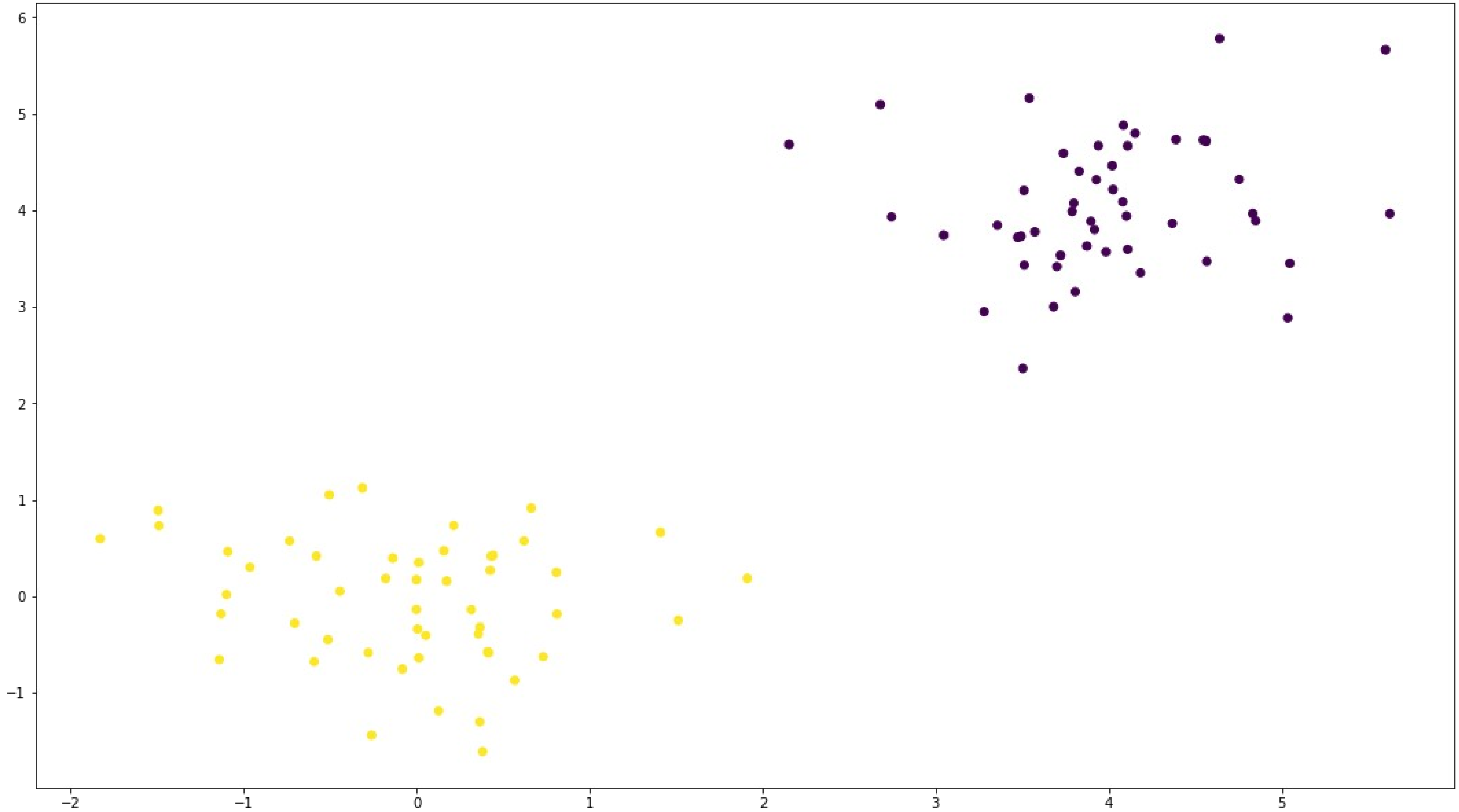
Perceptron példa három osztályra: eredmény - szeparációs hipersíkok



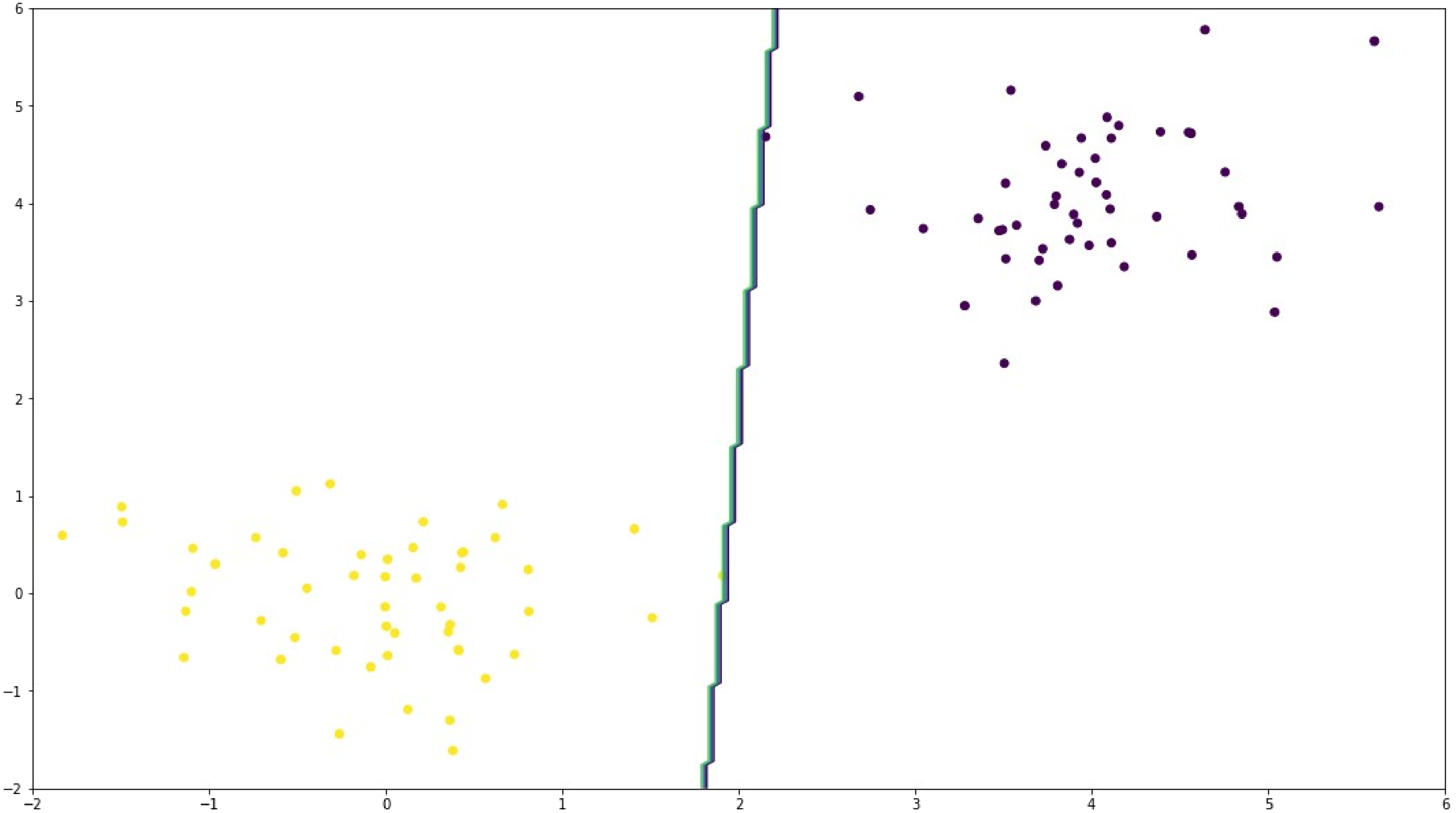
Perceptron példa három osztályra: eredmény - tartományok



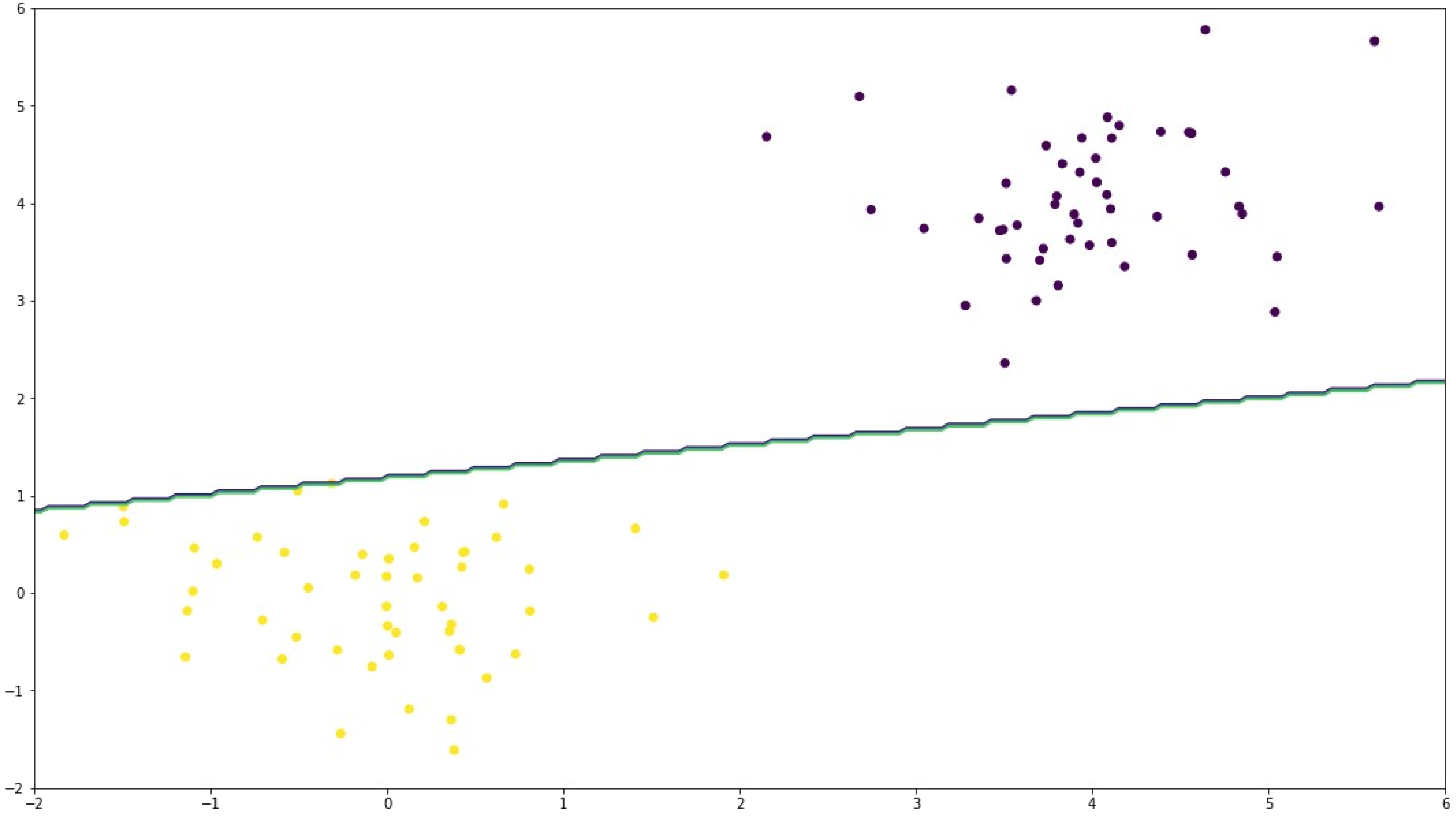
Perceptron példa két osztályra: bemeneti adathalmaz



Perceptron példa két osztályra: osztályozás függése a kezdeti értékektől



Perceptron példa két osztályra: osztályozás függése a kezdeti értékektől



Perceptron demo

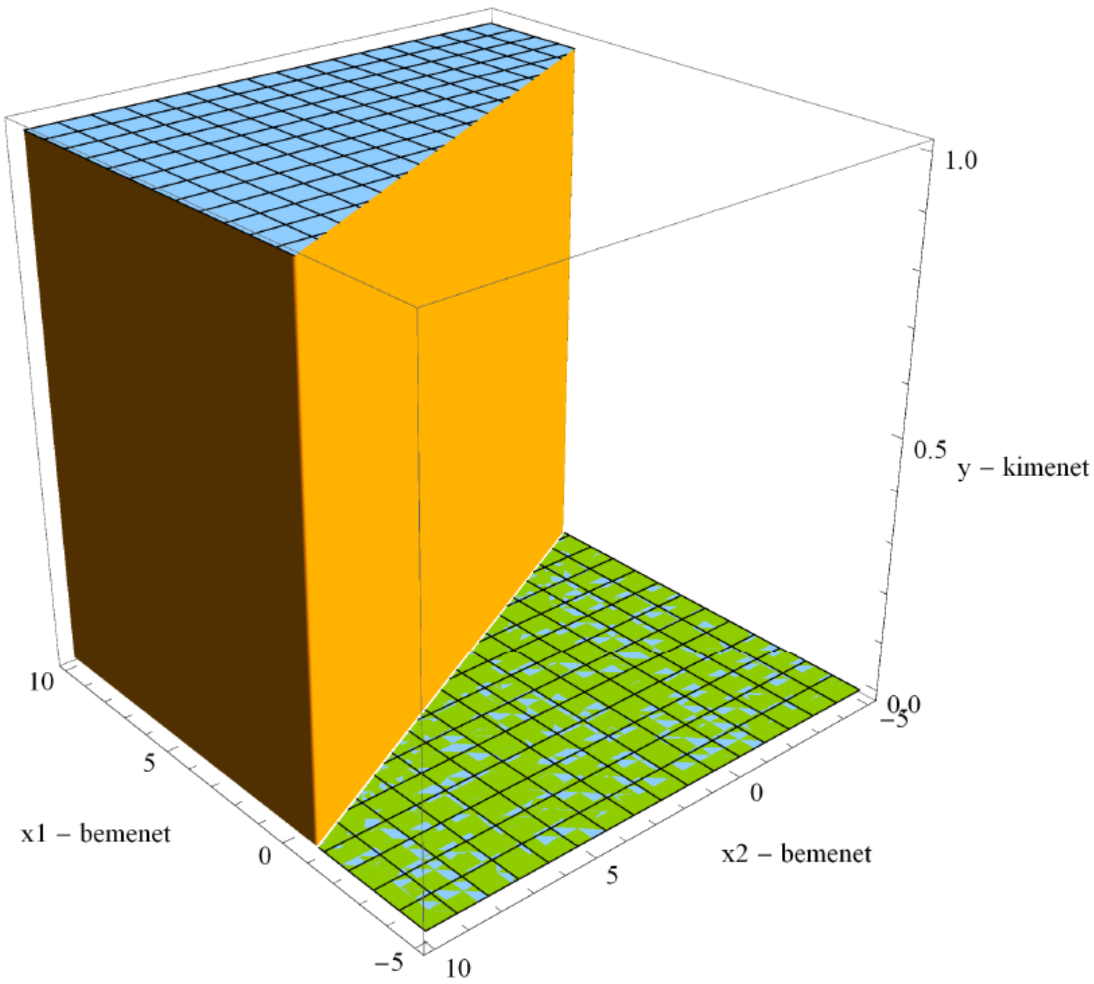
- Perceptron tanítása:
  - Két bemenet
  - Két osztály és három osztály esetén
- https://colab.research.google.com/drive/1H8EWHqw5bmMqqBYezGWXbaTliWkShLIO?usp=sharing#scrollTo=eYQMkNcIl-pC

Mesterséges neurális hálózatok:
Döntési felület

Döntési sík: egy egyszerű példán keresztül

- Osztályozási probléma
- Bemenetek:
  - x1, x2
- Kimenet:
  - y
- Perceptron hálózat, súlyok:
  - w1=0,5
  - w2=0,25
- Eltolás:
  - Z=2
- {x1, x2} síkon két kimeneti értéktartomány:
  - y=0
  - y=1
- Elválasztó felület:
  - Egyenes
- Magasabb dimenzióban:
  - **Döntési felület:**

    Hálózat kimeneti értékei alapján meghatározható bemeneti értéktartományokat elválasztó felület



Lineárisan szeparálható probléma

- Adott:
  - egy **n** dimenziós térben,
  - különböző osztályokba tartozó pontok.
- **Lineárisan szeparálható** az adott probléma:
  - Az egyes osztályok elkülönítése lehetséges egy **n–1** dimenziós hipersíkkal.