Kapitola 7

NEUROVÉ SÍTĚ

Obsah kapitoly:

Neuronové sítě jsou jedním z universálních modelů výpočtu. V době svého vzniku byly chápány jako významná alternativa k tehdejším počítačům. Zcela původně měly být jakýmsi modelem nervového systému, potažmo mozku. Postupně se však staly svébytným odvětvím, které postupně proniklo do mnoha vědních oborů. Přesto, že dnes jsou módním pojmem, mají za sebou více než padesátiletou pohnutou historii.

Kapitola 7 začíná vysvětlením základního konceptu neuronových sítí. Pokračuje stručným výčtem let blahobytu i strádání neuronových sítí a porovnáním neuronových sítí s jejich přírodními bratříčky. Pokusíme se také o klasifikaci spletitého světa neuronových sítí a o sondu do praktických aplikací. Práce na této kapitole byla podporována z grantu GA ČR 201/96/0917.

(7↱i)

■ Začínáme s neuronovými sítěmi

Neuronové sítě představují jednu z alternativ k běžným počítačům. Jedna z odlišností je, že se převážně neprogramují, ale učí z příkladů. Jiný podstatný rozdíl mezi neuronovými sítěmi a počítači je v architektuře. Uvedeme stručně základní koncept neuronových sítí a historii jejich vzniku.

Obsah:

- **Koncept neuronových sítí**
- **Historie neuronových sítí**
- **Přírodní inspirace**

7-1⋙ **Koncept neuronových sítí.** Představme si neuronovou síť jako černou skříňku se dvěma konci. Na jednom konci vkládáme příklady a na druhém jejich řešení. Pokud to činíme v jistém smyslu výchovně, naše černá skříňka je schopna do sebe předkládané znalosti vstřebat. To znamená, že po jistém učícím čase, sama na vstupní příklad vygeneruje správné řešení. Tuto schopnost sítě nazýváme *učící schopnost*. Možnosti neuronové sítě však zde nekončí. Pokud síti zadáme příklad, který nebyl v množině učících příkladů, neuronová síť je přesto často schopna vygenerovat správnou odpověď. Tento jev nazýváme *generalizací*. Neuronová síť je tak schopna jisté abstrakce. Výzkum prokázal, že tyto dvě schopnosti sítě jdou částečně proti sobě. Neuronová síť, která je schopna pamatovat si velké množství příkladů přesně má malou schopnost generalizace (zobecňování) a opačně. Tak tomu ovšem bývá i s lidmi.

Zatímco dnešní počítač má velmi sofistikovanou architekturu, kde každá jednotka plní specializované funkce, neuronová síť se skládá z mnoha jednoduchých jednotek (tzv. *neuronů*), které jsou vzájemně propojeny. Míra a struktura tohoto propojení se nazývá *architekturou* neuronové sítě. Jedno z paradigmat neuronové vědy tzv. *konekcionismus* dokonce tvrdí, že veškerá síla neuronových sítí tkví v množství a kvalitě vzájemných vazeb neuronů. Stejnou roli jako architektura hraje typ neuronu.

Bylo by chybou, domnívat se, že neuronová síť je schopna samostatného myšlení. Přesto však výsledky, kterých může dosáhnout, jsou často překvapivé i pro samotné vědce. To je jedna z nepřímých indicií, že se výzkum lidského myšlení, z něhož studium neuronových sítí vzešlo, ubírá správným směrem. Dnes je známo již několik expertních systémů, jejichž srdce tvoří neuronová síť. Své místo našly i v chemii. Např. v roce 1996 se konalo sympozium: *Genetic Algorithms and Artificial Neural Networks in Chemistry.* Bližší informace jsou na na Web adrese: `http://www-sci.sci.kun.nl/cac/ga-nn-symp/program.html`.

7-2⋙ **Historie neuronových sítí.** Na počátku neuronových sítí stáli zřejmě pánové Warren McCulloch a Walter Pitts kteří ve své práci: "A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity" v roce 1943 navrhli matematický model neuronu. V práci badatelé rovněž dokázali, že síť takovýchto neuronů je schopna realizovat všechny aritmetické, či logické funkce. Umělý neuron byl na světě a ukázal se jako velmi životaschopný. Inspirovali se jím i takoví velikáni počítačové vědy jako John von Neumann nebo Norbert Wiener. Doba činů však ještě nenazrála.

Pár let po narození, v roce 1949 se neuron vydal do školy. Jeho prvním učitelem se stal Donald Hebb, který v knize "The Organization of Behavior" navrhl a rozpracoval učící pravidlo synapsí neuronů. Jeho myšlenky se nadlouho staly živnou půdou pro všechny neuronové vědce.

50. léta lze prohlásit za stagnační období neuronových sítí, byť v té době slavná postava z neuronových čítanek Marvin Minsky realizoval první neuropočitač *Snark*, ale k zásadnějším posunům nedošlo. Za maturitu a následný nástup neuronu do pracovního procesu můžeme považovat události z konce padesátých a počátku šedesátých let. V roce 1957 Frank Rosenblatt zobecnil McCullochovův a Pittsův model pro reálný číselný obor a vytvořil tak *perceptron*. Rovněž navrhl učící algoritmus a dokázal, že pro daná tréninková data nalezne v konečném čase odpovídající konfiguraci neuronu.

Perceptron se vydal do světa a stal se vyhledávaným konstrukčním prvkem neuropočítačů. První z nich byl *Mark 1 Perceptron*, navržený pro rozpoznávání obrazců. Dnes by nám tento stroj připadal směšný. Obrazec byl promítán na matnici tvořenou 20×20 fotočlánky, které zajišťovaly vstup neuronové sítě perceptronů. Srdcem celého stroje byla neuronová síť s 512 váhovými parametry, jejiž adaptaci zajišťovala soustava potenciometrů poháněná pomocí elektromotorků. Celou sestavu řídil analogový obvod, v němž byl implementován učící algoritmus perceptronu. Učení takového stroje zvukově připomínalo prosperující včelín.

Další události na sebe nenechaly dlouho čekat. Jen namátkou zmiňme ADALINE (*ADAptive LINear Element*) Bernarda Widrowa a jeho studentů, nebo binární asociativní síť Karla Steinbucha. Nastal bouřlivý výzkum neuronových sítí, neuronového počítání a zdálo se, že k masové výrobě umělých mozků zbývá pouze malý krůček. Bohužel většina výsledků té doby byla pouze experimentální bez důkladného matematického základu. Konec šedesátých let zastihl neuronové sítě v krizi, kdy inflace myšlenek a vyčerpání většiny nápadů vedl k odlivu vědců do jiných oblastí umělé inteligence.

Poslední ranou byla výzkumná zpráva Marvina Minského a Seymoura Paperta, publikovaná později jako kniha *Perceptrons*. Autoři zde poukazují na fakt, že pomocí jednoho perceptronu nelze realizovat funkce XOR[1]. Tu je možno počítat až dvojvrstvou sítí se třemi perceptrony. Bohužel v té době nebyl znám učící algoritmus pro vícevrstvé neuronové sítě. Autorům se zejména i díky vážnosti, které se ve vědeckém světě těšili, podařilo přesvědčit akademickou obec o nemožnosti takového algoritmu. Zájem o neuronové sítě, zejména ve Spojených státech na dlouho ustal. Výzkum dále pokračoval mimo hlavní scénu umělé inteligence a přispěli k němu vědci jako Stephan Grossberg, Teuvo Kohonen, James Anderson a další. To však vedlo k tomu. že důležité výsledky zapadly a bylo je třeba znovuobjevovat v letech osmdesátých (viz. např. backpropagation).

Znovuzrození neuronových sítí nastalo počátkem 80. let. Léta tichého výzkumu přinesla své ovoce. Neuronoví vědci začali podávat samostatné grantové projekty a nové výsledky na sebe nenechaly dlouho čekat. V letech 1982 a 1984 fyzik John Hopfield ukázal důležitou souvislost mezi tzv. symetrickými neuronovými sítěmi a fyzikálním modelem magnetických materiálů, která vedla k důkazu konvergence takových sítí. Za nejdůležitější výsledek lze však bezpochyby považovat algoritmus zpětného šíření chyby (*backpropagation*), publikovaný roku 1986 trojicí vědců: Davidem Rumelhartem, Geoffreyem Hintonem a Jamesem McClellandem, kteří definitivně rozptýlili pochyby Marvina Minskeho. Tento algoritmus je do dnešní doby nejpoužívanějším učícím postupem pro neuronové sítě a vavříny jeho objevitelům nevezme ani fakt, že byl objeven i v šedesátých letech.

Neuronové sítě byly opět přijaty do vědeckého světa a záhy se zabydlely v různých oborech. Namátkou jmenujme teorii aproximace funkcí, funkcionální analýzu, výpočetní složitost, či teorii učení. Tato symbióza přinesla řadu teoretických i praktických výsledků v neposlední řadě i v komerční oblasti. Dnes se zdá koncept neuronových sítí z vědeckého hlediska opět vyčerpán. Hlavní výsledky byly dokázány, včetně převodu jednotlivých problémů do hávu 'standardní' Computer Science. Ale není doba ukvapených soudů, ještě se může leccos změnit.

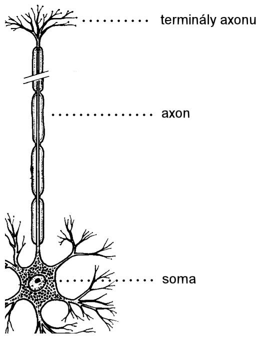
7-3⋙ **Přírodní inspirace.** Jen těžko lze zastírat pravý účel vzniku neuronových sítí. Od počátku se badatelé snažili modelovat činnost lidského mozku. Proto se většinou obraceli k fyziologii, potažmo k neurologii. Nastiňme nyní v kostce celou problematiku z pohledu neurofyziologa.

Nervová soustava člověka se skládá z několika složek. Nejdůležitějšími z nich jsou neurony a glie. Funkce glií není dodnes plně probádána, ale všeobecně se míní, že tvoří jakýsi podpůrný mechanismus

[1] XOR je logická funkce na dvou vstupech, která má hodnotu 0, jsou–li vstupy stejné a hodnotu 1, jsou–li různé.

celé nervové soustavy. Zájem o glie slále roste a zdá se že jejich úloha je mnohem větší, než se dříve mínilo. My však se o nich dále zmiňovat nebudeme. Mnohem podstatnější úlohu v našich modelech budou hrát samotné neurony. Jen v samotném mozku se jich nachází okolo patnácti miliard.

Neuron se skládá z těla *(soma)* a dále výstupního *axonu* a vstupních *dendritů.* Axon je zakončen *terminály*, které jej spojují s dendrity ostatních neuronů. Takto může být neuron spojen až s 5 000 dalšími neurony. Vrstvu mezi terminály a dendrity nazýváme synapsí. Míra propustnosti synapse ovlivňuje přenos vzruchu od terminálů k následným dendritům. Schopnost synaptické vrstvy přenášet vzruch nazýváme *excitací* a naopak tlumící schopnost *inhibicí.* Jednoduché schéma neuronu je na obrázku 1. Šíření vzruchu v nervové soustavě probíhá zhruba takto. Dendrity neuronu jsou podrážděny



Obrázek 1: Schéma biologického neuronu.

a neuron po dosažení určitého stupně podráždění sám produkuje vzruch, který předává terminály axonu přes synaptickou vrstvu na dendrity dalších neuronů atd. Právě míra synaptické propustnosti, tj. schopnosti předávat vzruch, hraje významnou roli při vytváření paměťových stop. Její změnou je vysvětlována schopnost učení.
[redacted]

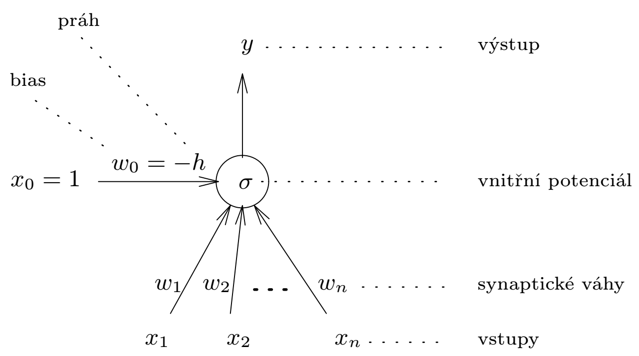
(7↱ii)

★ Taxonomie neuronových sítí

Uvedeme různé typy neuronových sítí. Za dobu své existence se jejich svět značně rozrostl a není zdaleka v možnostech tohoto článku referovat o všech druzích i podruzích. Hloubavější čtenář nechť zalistuje příslušnou literaturou. Život neuronových sítí probíhá v cyklickém střídání dvou fází. Učení a vykazování naučených znalostí. První fáze je řízena tzv. adaptivní mechanikou, *druhá pak* aktivní mechanikou. *U všech popsaných druhů sítí se zmíníme postupně o obou fázích.*

Obsah:

7-4⋙ **Neuron.** Matematický model neuronu, na jehož základě jsou neuronové sítě vystavěny, získáme zjednodušením fysiologických představ a jejich formulací do pregnantní řeči funkcí a čísel. Nejlépe tento model pochopíme z obrázku 2. Neuron sčítá vstupní podněty vynásobené vahami, a pokud tento



Obrázek 2: Formální neuron.

součet přesáhne určitou mez (práh) vystřelí, tj. vrátí na výstup hodnotu 1. V opačném případě vrátí hodnotu 0. Matematicky bychom to mohli vyjádřit takto:

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

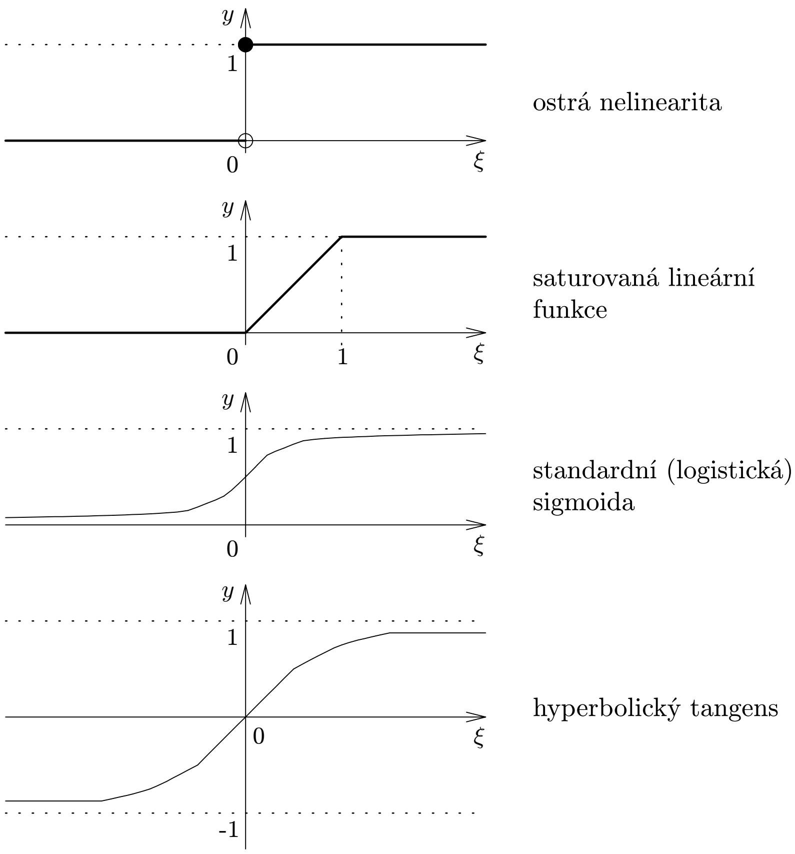
x_i jsou hodnoty vstupů a w_i takzvané váhy. Prahová hodnota w_0 určuje, při jaké hodnotě vážené sumy má neuron vystřelit. Funkce σ je tzv. aktivační funkce. Jako aktivační funkce se nejčastěji užívá *sigmoida* (viz. obr 3). Zobrazeným sigmoidám přísluší následující vzorce:

$$\sigma(x) = \begin{cases} 1 & x \geq 0 \\ 0 & x < 0 \end{cases}$$

$$\sigma(x) = \begin{cases} 1 & x > 1 \\ x & 0 \leq x \leq 1 \\ 0 & x < 0 \end{cases}$$

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

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

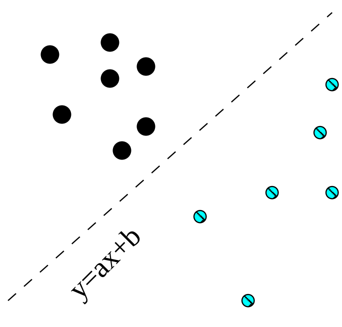


Obrázek 3: Grafy sigmoidních aktivačních funkcí.

Nejlépe pochopíme funkci perceptronu z obrázku 4. Vstupem neuronu budou souřadnice bodu v n-rozměrném (v našem případě dvourozměrném) euklidovském prostoru. Pro tento dvojrozměrný případ se rovnice 1 redukuje na

$$y = \sigma(w_1x_1 + w_2y_2 + c)$$

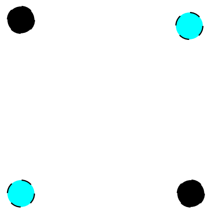
Rovnici $w_1x_1 + w_2y_2 + c = 0$ lze ovšem nahlížet jako rovnici přímky v rovině. (Na obrázku 4 ji pro jednoduchost píšeme jako $y = ax+b$.) Vidíme, že výraz uvnitř závorek je vlastně rovnicí přímky v rovině.



Obrázek 4: Geometrická interpretace neuronu

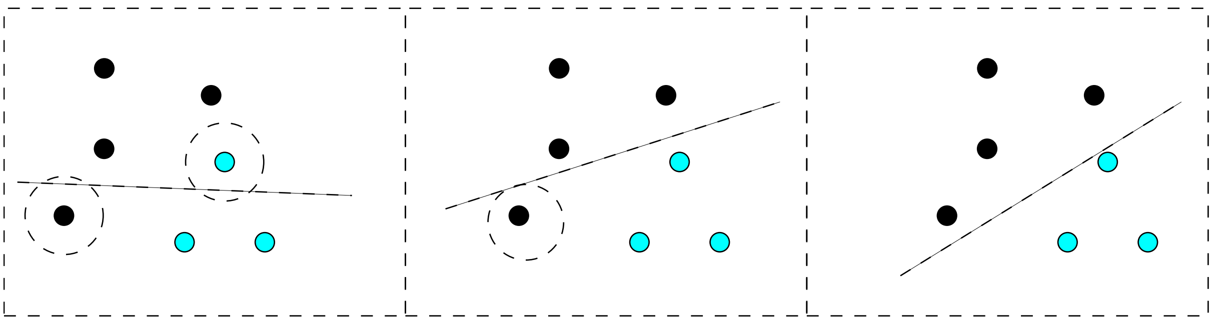
Pokud funkci σ nahradíme ostrou nelinearitou, mají body ležící nalevo od přímky hodnotu 0 a body napravo hodnotu 1.

Lze si snadno představit, že pomocí jednoho neuronu dokážeme oddělovat množiny bodů od sebe přímkou. Jednoduchý neuron vlastně dělí rovinu na dvě poloroviny. Je samozřejmé, že pokud tyto množiny od sebe principiálně takto oddělit nelze, neudělá to ani neuron. Příklad nejjednodušší takové množiny najdete na obrázku 5. Zkuste promyslet, proč tomu tak je. Podobně je tomu i ve vyšších dimenzích. Podívejme se ještě na proces učení. Na obrázku 6 je zobrazen postup učení při oddělování dvou



Obrázek 5: Čtveřice bodů v rovině, které nelze oddělit přímkou.

množin bodů. Neuron se snaží změnit svoje parametry tak, aby chyba odpovědi byla co nejmenší. Tento způsob se nazývá *minimalizace chyby* a patří mezi oblíbené metody učení. S ním a jeho modifikacemi se setkáme v následujícím. Zmiňme na závěr tohoto odstavce, že neurony můžeme rozdělit na *diskrétní*, tj.

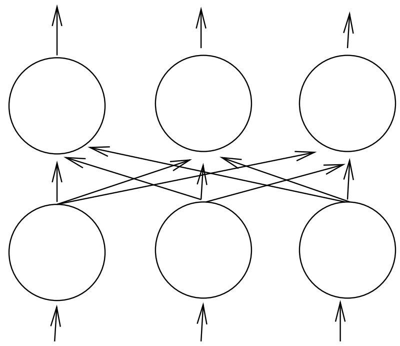


Obrázek 6: Proces učení neuronu. Body, které mají být odděleny zde jsou vyznačeny různými stupni šedi. Pomocí kružnic označujeme, které body nejsou ještě správně klasifikovány.

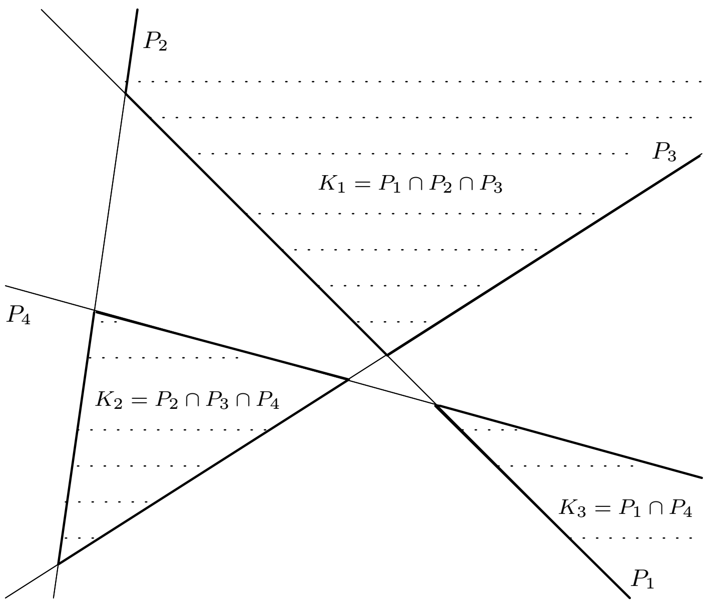
hodnoty vstupů i výstupů jsou jen čísla 0, 1 a spojité, kdy tyto veličiny nabývají hodnot z oboru např. reálných, či komplexních čísel. Byť se vlastně jedná o pouhou záměnu aktivační funkce je toto dělení důležité. Diskrétní neuron se používá zejména při zkoumání složitostních úloh, spojitý neuron má své místo v otázkách funkční aproximace. Pokud narazíme v literatuře na neuron, je dobré zjistit, s jaký typem autor manipuluje, neboť techniky práce se u obou podstatně liší.

7-5⋙ **Vrstevnaté perceptronové sítě.** Upřímně řečeno jeden neuron není příliš silný výpočetní prostředek. Mnohem lepšího výsledku dosáhneme, necháme-li neurony pracovat v týmu. Vnitřní organizace takového týmu může být různorodá. V této sekci probereme architektury, kdy jsou jednotlivé neurony organizovány do vrstev. Neurony z jedné vrstvy jsou spojeny pouze se všemi neurony vyšší vrstvy. Neexistují žádné vazby mezi neurony jedné vrstvy, ani vazby zpětné (viz obr 7). Na tomto místě někoho možná napadne, zdali neuronová síť v níž jsou propojeny všechny neurony není 'silnější', nežli síť na jejíž architekturu klademe takové restriktivní požadavky. V jistém smyslu ano, neboť se jedná o nadmnožinu. Na druhou stranu učení tak velké sítě by stálo příliš mnoho času. Vrstevnatá neuronová síť je navíc průhlednější, a z naučené sítě lze nezřídka provést hlubší analýzu problému.

Hloubavý čtenář již jistě provedl následující úvahu: Pokud jeden neuron je schopen dělit rovinu na poloroviny (prostor na poloprostory), pak dva neurony v jedné vrstvě jsou sto vyrobit průnik těchto polorovin. Takto lze tedy s neuronovou sítí, která má jednu skrytou vrstvu, klasifikovat průniky



Obrázek 7: Vrstevnatá neuronová síť. Šipkami jsou vyznačeny spojení mezi neurony.



Obrázek 8: Schéma, jak síť s jednou skrytou vrstvou může dělit rovinu.

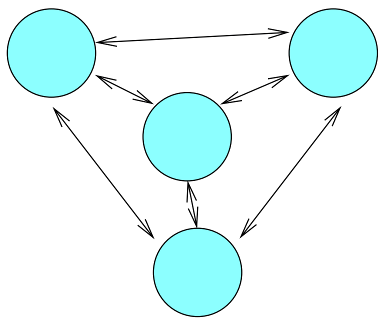
libovolného počtu různých polorovin. Obrázek 8 osvětluje situaci s třemi neurony. Aktivní dynamika vrstevnaté sítě probíhá takto: Nejprve neurony první (vstupní vrstvy) přijmou vzruchy a aplikují příslušné operace (násobení váhovým vektorem, aktivační funkce). Z jejich výstupů je signál předán neuronům další vrstvy a tak se pokračuje až k vrstvě nejvrchnější. Výstupy neuronů této poslední vrstvy tvoří současně i výstup samotné neuronové sítě.

Podívejme se nyní na adaptivní mechaniku, neboť právě kolem ní se točí důležitý koncept. Jedná se o *backpropagation*, neboli algoritmus zpětného šíření. Začněme pro jednoduchost pouze s jedním neuronem. Neuron se na začátku této fáze nachází ve stavu, kdy má nějak nastavené váhy. Na vstup dostane nějaký učící vzor $(x_1 \dots x_n)$ a na výstup správnou odpověď d na tento vzor. Odpověď neuronu označme y. Úkolem učící fáze je minimalizovat chybu $E = d - y$ pro všechny učící vzory změnou nastavení svých vah. Mějme j učících vzorů. Označme d_j správné odpovědi a $y_j(\mathbf{w})$ odpovědi neuronu s váhovým vektorem $\mathbf{w}$ na j-tý učící vzor. Správně naučený neuron by měl minimalizovat chybovou funkci $GE(\mathbf{w}) = \sum_{k=1}^{j}(d_k - y_k(\mathbf{w}))^2$. Minimalizovat takovou funkci lze například prostřednictvím gradientních metod. (Speciálním případem je např. hledání minima funkce jedné proměnné pomocí nulových bodů její derivace.) Tyto metody jsou založeny na parciálních derivacích $\delta GE/\delta w_k$ funkce GE, které určují směr největšího úbytku této funkce.

Stejnou metodu bychom mohli použít, kdyby všechny neurony byly výstupní. Náš případ je ovšem jiný. Výstupní neurony jsou pouze ty z nejvyšší vrstvy. Proto algoritmus aplikujeme nejprve na ně a chybu postupně přenášíme (propagujeme) do vrstev nižších až k samotným vstupním neuronům. Protože tento proces jde opačně, než probíhá aktivní dynamika nazýváme ho zpětným šířením (backpropagation). Technické detaily bohužel musíme na tomto místě pominout.

Hlavní problém nastíněného postupu tkví v minimalizaci chybové funkce. Jistě si vzpomenete, že hledáním nulových bodů derivace funkce najdeme pouze *lokální* minimum funkce. Stejnou nemocí trpí i gradientní metody. Proto se někdy obohacují o náhodné změny, které mohou ovlivnit volbu vah. Nejznámějším takovým postupem je *simulované žíhání*. Zatímco metody jak minimalizovat chybu jednoho neuronu mohou být radikálně různé, vedle zmiňovaných gradientních se zde mohou aplikovat i stochastické, či genetické algoritmy, princip zpětného šíření chyby je u většiny učících postupu zachován.

<u>7-6</u>⋙ **Hopfieldovy sítě.** Sláva Hopfieldových sítí pramení z několika zdrojů. Jedním z nich je fakt, že tyto sítě mají svůj fyzikální ekvivalent v tzv. spinových sklech. Neméně důležitou analogií je podobnost s asociativní pamětí. Poslední ne však zanedbatelný fakt je krásná matematická teorie opřádající tyto sítě. O co jde? O symetrii. Každé dva neurony jsou spojeny symetrickými vahami ($w_{ij} =$



Obrázek 9: Symetrická neuronová síť. Šipkami jsou znázorněny symetrické váhy.

w_{ji}). Každý neuron je zároveň vstupní i výstupní. Omezme se pro jednoduchost na diskrétní případ. Na rozdíl od předcházejících vrstevnatých sítí však výstupní hodnoty neuronů budou 1 a -1. Popíšeme nyní aktivní dynamiku. Neurony, resp. jejich výstupy označíme y_i váhy mezi neurony i a j označíme w_{ij}. Každý neuron je na začátku nastaven na svojí vstupní hodnotu, -1, 1. V dalším kroku neurony svojí hodnotu aktualizují dle hodnot ostatních neuronů. Aktualizace hodnot se provádí vždy u všech neuronů najednou. Ty nejprve spočtou svůj vnitřní potenciál podle vzorečku:

$$P_j^{(t)} = \sum_{i=1, i\neq j}^{n} (w_{ij} y_i^{(t)})$$

dále upraví své hodnoty podle spočtených potenciálů dle následujícího vzorce:

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

A tak stále dokola. Výstup sítě se neustále mění. Jak poznáme, který je ten správný? Na štěstí je dokázáno, že se tento proces nakonec zastaví. Přesněji řečeno, skončí buď tak, že se hodnoty všech neuronů stabilizují, nebo že se celá síť ustálí ve dvou střídajících se stavech. Pokud jsou hodnoty stbilizovány, prohlásíme je za výstup sítě.

Stav Hopfieldovy sítě lze popsat pomocí tzv. energetické funkce:

$$E(t) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} \left(\sum_{j=1}^{n} w_{ij} y_j^{(t)} \right) y_i^{(t)}$$

Během aktivní fáze hodnota této funkcí klesá. Na konci aktivní fáze se stav sítě nachází v lokálním minimu energetické funkce. Činnost Hopfieldovy sítě lze takto nahlédnout z představy kuličky položené na zvlněnou plochu, která se pohybuje po spádnici.

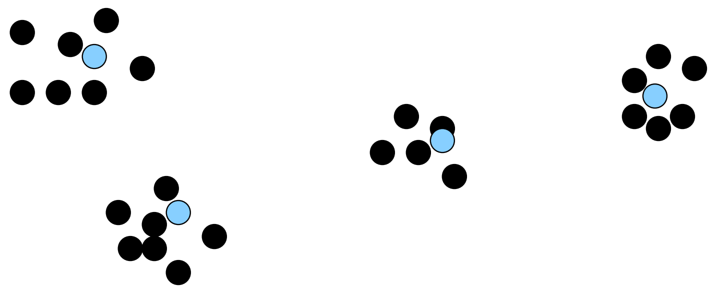
Adaptivní mechanika probíhá u této sítě aplikací *Hebbova zákona*. Tento zákon je jiným učícím paradigmatem neuronových sítí. Říká zhruba toto: pokud dva neurony odpovídají na určitý podnět stejně, vazba mezi nimi se posiluje. V konkrétním případu Hopfieldových sítí lze Hebbův zákon aplikovat takto: Pokud chceme vnutit neuronům x_i a x_j stavy s_1, s_2, přičteme k jejich spojující váze w_{ij} jejich součin:

$$w_i j^{(t)} = w_{ij}^{(t-1)} + s_1 s_2 \tag{2}$$

Mějme na paměti, že součin stavů dvou neuronů je buď 1, pokud jejich hodnoty jsou stejné, nebo -1, pokud jejich hodnoty jsou různé. Tento mechanismus lze popsat slovy: pokud pro nějaký vzor neurony x_i a x_j hlasovaly stejně, vazba mezi nimi se posílí. Váha tedy v tomto případě vyjadřuje jakousi historii vzájemných vztahů obou neuronů.

Hopfieldova síť vykazuje zajímavou vlastnost. Z libovolného počátečního stavu se nakonec ustálí (ustálí-li se) v některém již naučeném vzoru. Z toho vychází i její způsobilost simulovat asociativní paměť.

<u>7-7</u>⋙ **Kohonenovy sítě.** Zapomeňme na chvíli na všechno, co jsme dosud povídali a podívejme se na zcela odlišný druh neuronových sítí. Začneme klasickým problémem. Máme obrovské množství dat (na obrázku 10 jsou zobrazena jako tečky) a chceme z nich vybrat malé množství reprezentantů (na našem obrázku šedě), kteří co možná nejlépe naší množinu dat zastupují. Ujasněme, co po reprezentantech



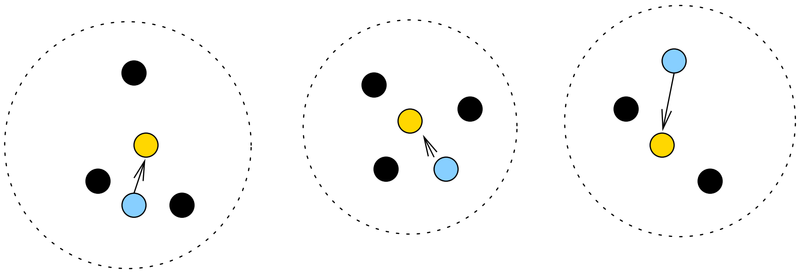
Obrázek 10: Černé body znázorňují data, šedé reprezentanty.

chceme. Každému prvku z množiny dat přísluší právě jeden reprezentant Mnoha prvkům bude odpovídat stejný reprezentant, který se navíc nemusí shodovat z žádným prvkem z množiny dat. Jeden ze způsobů řešení tohoto problému je minimalizovat součet vzdáleností reprezentantů od dat, které reprezentují. Z tohoto principu vychází i tzv. Lloydův algoritmus:

1. Zvolíme reprezentanty náhodně.
2. Ke každému reprezentantu určíme, která data reprezentuje, tj. ta, která jsou mu nejblíže.
3. Ke každé množině reprezentované daným reprezentantem najdeme její těžiště a to zvolíme novým reprezentantem.
4. Pokračujeme krokem 2.

Nevýhodou navrženého algoritmu se zdá být fakt, že během kroku 2 musíme projít celou množinu dat, jež může být velká. Mnohem výhodnější by se v tomto kontextu jevil přístup, kdy celou množinou procházíme pouze jednou. Takovou modifikaci Lloydova algoritmu navrhl Kohonen a my si ji nyní popíšeme v terminologii tzv. *samoorganizačních sítí*. Navržená metoda učení se jmenuje podle svého tvůrce *Kohonenovo učení*.

Síť se skládá ze dvou vrstev. Jednotky první vrstvy jsou spojeny ze všemi jednotkami druhé vrstvy. Spodní, vstupní vrstva obsahuje n neuronů, vrchní vrstva k neuronů. Vstupy spodní neurony budou zastupovat data, tedy černé body na našich obrázcích, neurony vrchní vrstvy budou tvořit reprezentanty (šedivé body). Každému neuronu vrchní vrstvy bude odpovídat jeden reprezentant.



Obrázek 11: Jeden krok Lloydova algoritmu. Černě jsou vyznačena data, šedě reprezentanti. Pomocí tečkovaných kružnic je označena příslušnost dat k reprezentantům. Šipky ukazují posun reprezentantů směrem k těžišti.

Vstupem do naší sítě bude tedy vektor n reálných čísel, která přichází současně do n neuronů spodní vrstvy. Váhy i-tého neuronu vrchní vrstvy určují polohu i-tého reprezentanta v prostoru vstupů. i-tý neuron vrchní vrstvy se aktivuje v případě, že je nejblíže ze všech reprezentantů danému vstupu. Formálně zapsáno to znamená, že se na něm minimalizuje funkce $\sum_{j=1}^{n}(x_j - w_{ij})$, kde x_j jsou hodnoty vstupů a w_{ij} jsou váhy mezi neurony x_j a y_i.

Učení sítě probíhá následovně: Postupně procházíme množinou dat a necháváme síť odpovídat. Neurony mezi sebou v této fázi soutěží, který bude ‘zvolen reprezentantem’. Vítěznému neuronu (v našem případě nejbližšímu) posuneme váhy směrem k předloženému vzoru podle rovnice:

$$w_{ij}^{(t)} = \epsilon(x_i^{(t-1)} - w_{ij}^{(t-1)}) \quad (3)$$

Indexem (t) označujeme stav váhy v čase t. Faktor ϵ určuje rychlost učení a je třeba jej měnit. Většinou je zpočátku nastaven na hodnotu 1 a postupně je snižován.

Jinou variantou navrženého algoritmu jsou *Kohonenovy mapy*. Při tomto postupu jsou posilovány nejen váhy vítězného neuronu, ale i jeho bezprostředních sousedů.
[redacted]

(7↱iii)

★ Aplikace neuronových sítí

Dost bylo teorie, zabývejme se nyní na tomto místě praktickými výsledky. V současné době existuje již mnoho aplikací využívajících zcela, nebo částečně ku své práci neuronové sítě. Jedná se většinou o expertní systémy, tedy nástroje určené k predikci, či klasifikaci dat.

Obsah:

- **Klasifikace**
- **Predikce**
- **Řízení**
- **Komprese dat**
- **Aplikace neuronových sítí v chemii**

<u>7-8</u>⋙ **Klasifikace.** Neuronové sítě jsou přirozeným klasifikačním nástrojem. Chceme-li např. rozdělit data do dvou tříd, zvolíme síť s jedním diskrétním výstupním neuronem, který rozhoduje, zda data patří do jedné (výstup 1), či druhé (0) třídy. V případě potřeby více tříd pouze zvýšíme počet výstupních neuronů. Ke klasifikaci lze též s výhodou použít samoorganizační Kohonenovy sítě.

<u>7-9</u>⋙ **Predikce.** Predikce, zejména tzv. časových řad je jedna z nejžádanějších aplikací umělé inteligence vůbec. Mnoho lidí sní o úspěšné kariéře burzovního makléře, a tak není divu, že honba za metodami odhadů cen akcií postihla i neuronové sítě. Aplikace je v tomto případě jednoduchá. Základním východiskem je víra, že existuje funkce která na základě znalosti n předcházejících kurzů sledované akcie dokáže predikovat následující vývoj. Takovou funkci můžeme ovšem nahradit např. vrstevnatou neuronovou sítí s n vstupy. Osoby s jinými, než burzovními zájmy snad uspokojí fakt, že pomocí neuronových sítí byly úspěšně predikovány skrny na slunci.

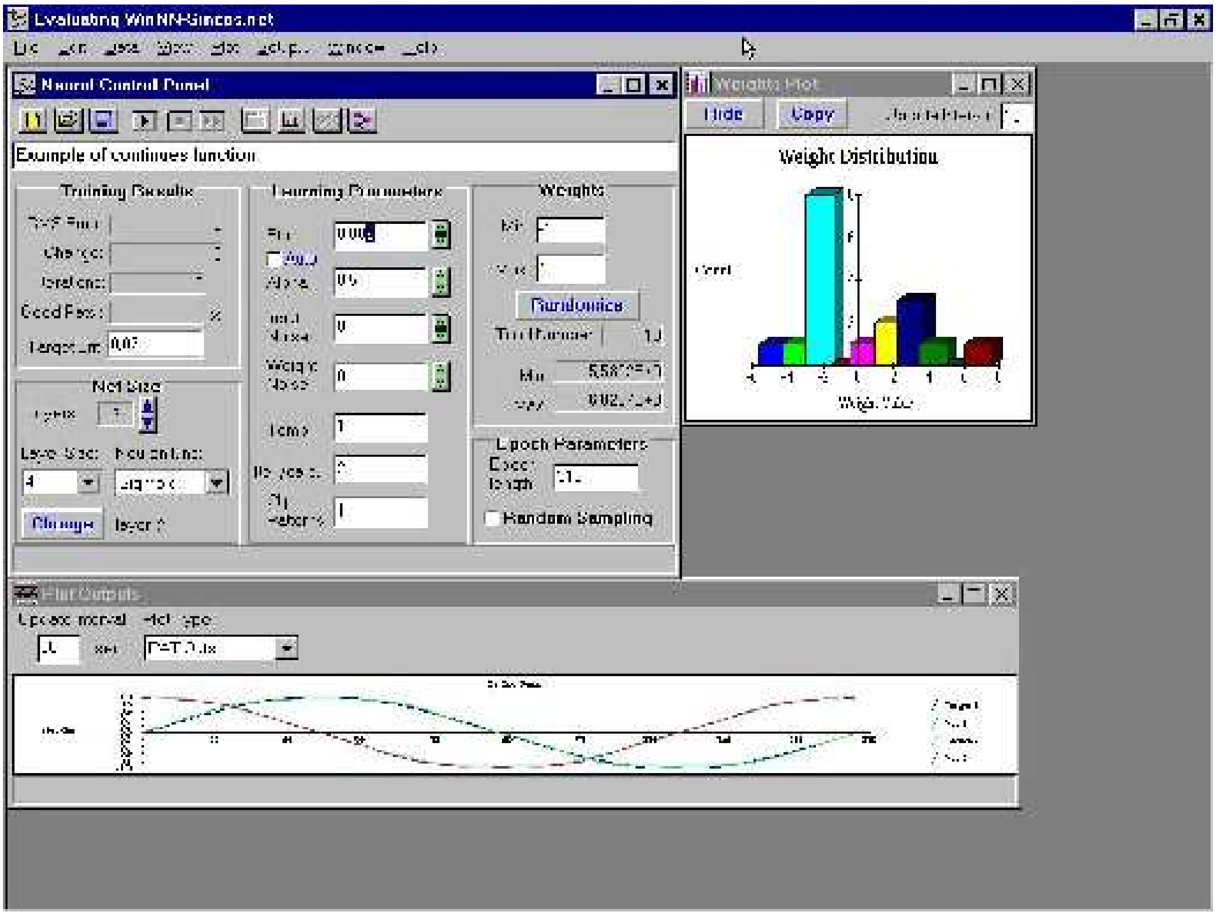
<u>7-10</u>⋙ **Řízení.** Aplikací neuronových sítí v řízení je více než dost. Analogie s lidským nervovým systémem napovídá, že dobře navržená síť může leckde nahradit lidskou práci. Neuronové expertní systémy mají místo všude tam, kde expert není schopen zformulovat pravidla, dle kterých se řídí. Učení se z příkladů může nahradit práci mnoha analytiků.

<u>7-11</u>⋙ **Komprese dat.** Naučená neuronová síť je vlastně reprezentací naučených dat. A to reprezentací ne příliš velkou. U každého neuronu si musíme pamatovat pouze několik vah, což většinou ve srovnání s původními objemy je množství zcela zanedbatelné. Samozřejmě je problematické zamezit ztrátovosti takové komprese, ale u mnohých dat (např. u obrázků) ani bezztrátovost nevyžadujeme. Obecně lze bezztrátovou kompresi zajistit pomocí sítě s třemi vrstvami $n - k - n$, kterou naučíme identickou funkci. Pak neurony prostřední vrstvy reprezentují komprimovaná data.

7-12≫ **Aplikace neuronových sítí v chemii.** Jistě nás již nepřekvapí, že neuronové sítě našly své místo i v chemii. Expertní systémy na zpracovéni dat jsou potřebné všude. Na WWW adrese http:// www.emsl.pnl.gov:2080/proj/neuron/neural/research.html#appl nalezneme odkazy na literaturu týkající se aplikací neuronových systémů v chemii, spektometrii, molekulárním modelování, senzorové analýze, či v řízení chemických procesů.

Vyzkoušejme nyní, jak fungují neuronové sítě v praxi. Jako nástroj nám bude sloužit sharewarová verze programu WinNN, kterou je možno získat na URL adrese ftp:// ccl.ocs.edu/ pub/chemistry/software/MS_WIN95-NT/Neural-Networks/. Program je určen k učení vrstevnatých neuronových sítí s různými typy aktivačních funkcí. Program přeneste, naistalujte a spusťe. Projdeme nyní práci s programem na příkladu učení funkce $sin(x)$ neuronovou sítí.

V menu `File` vyberte `Open Net`. Ve složce Examples se nachází několik ukázkových sítí. Vyberme `Sincos.net`. Otevře se několik oken:



Obrázek 12: Okna aplikace WinNN.

Neural Control Panel hlavní okno celé aplikace. Zcela nahoře je lišta s ovladači. Pomocí jednoduché šipky spustíme učící (adaptivní) proces, pomocí čtverečku jej zastavíme, pomocí dvojité šipky můžeme vyzkoušet naučenou síť ze znalosti vzorů (aktivní dynamika). Další ikonky slouží k aktivaci ostatních oken aplikace. Zbytek okna je rozdělen do několika oblastí.

V oblasti **Training Results** se zobrazují průbežné výsledky učení: počet iterací (Iterations), chyba sítě (RMS Error), změna této chyby po dalším průchodu tréninkovou množinou (Change), procento dobře naučených vzorů (Good Pats) a povolená odchylka od původních vzorů (Target Err).

V oblasti **NetSize** měníme architekturu naší sítě (zobrazuje se v okně NetLayout). Měnit lze počet vrstev (Layers), počet neuronů v jednotlivých vrstvách (Layer size) a aktivační funkci

(Neuron Func.)

Oblast **Learning Parameters** slouží k ovlivňování adaptivní dynamiky, tj. procesu učení. Bližší info k těmto parametrům lze přečíst v helpu celé aplikace.

Vlatnosti množiny vah měníme v oblasti **Weights**. Nastavit zde můžeme interval v jakém se váhy nacházejí, případně vygenerovat náhodné váhy tlačítkem Randomize.

Net Layout V tomto okně můžeme síť prohlížet. Síť je kreslena zleva doprava, vstupy jsou označeny písmeny **i**, výstupy písmeny **o**. Váhy jsou odlišeny barevně a jejich hodnoty odečítáme z přiložené tabulky.

Weights Plot je okno, kde je zobrazeno statistické rozdělení naučených vah.

Plot Outputs okno z grafy zobrazující původní vzory a odpovědi naší sítě. Zde můžeme zjistit, jak se síť zatím naučila požadovaný vzor.

Pokud jsme otevřeli príklad, získali jsme síť již naučenou. V popsaných oknech můžeme zjistit, že naučenost síťě je opravdu dobrá. Chceme nyní vidět jak se síť do tohoto stavu dostala. Stikněme tlačítko Randomize v oddílu Weights okna Neural Control Panel. Tlačítkem s jednoduchou šipkou spustíme proces učení. Pokusíme se dokonvergovat s učením aspoň tak dobře jak se to povedlo autorům příkladu. Uvidíme, že to není nijak jednoduché.

O chemických aplikacích tohoto programu se můžeme dočíst na WWW adrese http://www.geocities.com/SiliconValley/Lab/9052/winn.html.

(7↱iv)

■ Komentovaná literatura

Pokud chceme podrobněji studovat neuronové sítě je dobré prostudovat následující zdroje. V češtině je asi nejobsažnější publikace autorů Šíma, Neruda: "Teoretické otázky neuronových sítí," vydané *MatFyzpressem* v roce 1996. Autoři v ní zpracovávají výsledky neuronové vědy v co možná nejširším rozsahu.

Z anglicky psaných úvodů do neuronových sítí lze např. doporučit:

- Haykin S.: "Neural Networks: A Comprehensive Foudation," *IEE Press*, 1994.
- Fausett L.: "Fundamentals of Neural Networks," *Prentice–Hall, Inc.*, 1994.
- Hagan M.T., Demuth H.B., Beale M.: "Neural Network Design," *PWS Publishing Company*, 1996.

K fundamentům literatury o neuronových sítích patří i "Neurocomputing" R. Hecht-Nielsena vydané v *Addison-Wesley*, 1990.

Pro chemiky je určena publikace "Neural Networks for Chemists: An Introduction" autorů J. Zupana a J. Gasteigera, *VCH Weinheim*, 1993.

Na Internetu je mnoho míst zpracovávajících neuronové sítě. K neznámějším patří *Neural Networks at PNNL* na Web adrese http:// www.emsl.pnl.gov:2080/proj/neuron/neural/. Nalezneme zde velké množství úvodů do neuronových sítí, ale i on-line demonstrací, aplikací a odkazů na literaturu. Pokud chceme začít s neuronovými sítěmi, lze toto místo jen doporučit jako startovní stránku. Jiným startovním místem mohou být Web stránky na adrese http://www.yahoo.com/Science/Engineering/Electrical_Engineering/Neural_Networks/.

Dalším dobrým místem je *Neurosciences on the Internet* na Web adrese http://www.neuroguide.com/. Jedná se o katalog internetovských neuronových zdrojů. K nepřehlédnutelným stránkam patří také *Eric H. Chudler's Systems Neuroscience Resources* na Web adrese http://weber.u.washington.edu/ chudler/ehc.html.