

Umetne Nevronske Mreže

UNM (ANN)

- Glede na način učenja se ločujejo na
 - Nenadzorovane (1)
 - Nadzorovane (2)
- (1) Kohonenove nevronske mreže
- (2) Nevronske mreže z vzratnim širjenjem napake (error back propagation NN)
- (2..1) Protitočne nevronske mreže (counterpropagation NN)
- (2) RBF nevronske mreže (radial basis function)

Začetki 1943: McCulloch in Pitts, "A Logical Calculus of Ideas Immanent in Nervous Activity"

Leta 1949: Donald Hebb, "The Organization of Behavior", predlaga Hebb-ovo pravilo (ojačitev povezave med sosednjimi vzbujenimi nevroni, ta aktivnost je osnova za učenje in memoriranje).

Leta 1962: Frank Rosenblatt, knjiga "Principles of Neurodynamics" z uporabo McCulloch-Pitts-ovega nevrona in Hebbovega pravila razvije prvi **perceptron**.

Leta 1969: Minsky in Papert, knjiga "Perceptroni" utemeljitev, zakaj imajo perceptroni teoretične omejitve pri reševanju nelinearnih problemov.

Leta 1982: John Hopfield, vpelje nelinearnost v osnovno funkcijo nevrona. S tem odpravi pomanjkljivosti in odpre novo obdobje raziskav umetnih nevronske mreže.

XOR

Input x_1	Input x_2	Output
0	0	0
0	1	1
1	0	1
1	1	0

Tuevo Kohonen (rojen 1934), Finski akademik. “Self-organizing maps” Kohonen,

Leta 1960: T. Kohonen vpelje nov koncept v “neural computing” asociativni spomin, optimalno asociativno mapiranje, self-organizing feature maps (SOMs).

Kohonen, T. and Honkela, T. (2007). "Kohonen network"
http://www.scholarpedia.org/article/Kohonen_network

Leta 1986: Rumelhart s sodelavci objavili nov algoritem za tako nevronske mreže s vzvratnim širjenjem napake (error back-propagation)

Learning representations by back-propagating errors

DAVID E. RUMELHART^{*}, GEOFFREY E. HINTON[†] & RONALD J. WILLIAMS^{*}

^{*}Institute for Cognitive Science, C-015, University of California, San Diego, La Jolla, California 92093, USA

[†]Department of Computer Science, Carnegie-Mellon University, Pittsburgh, Philadelphia 15213, USA

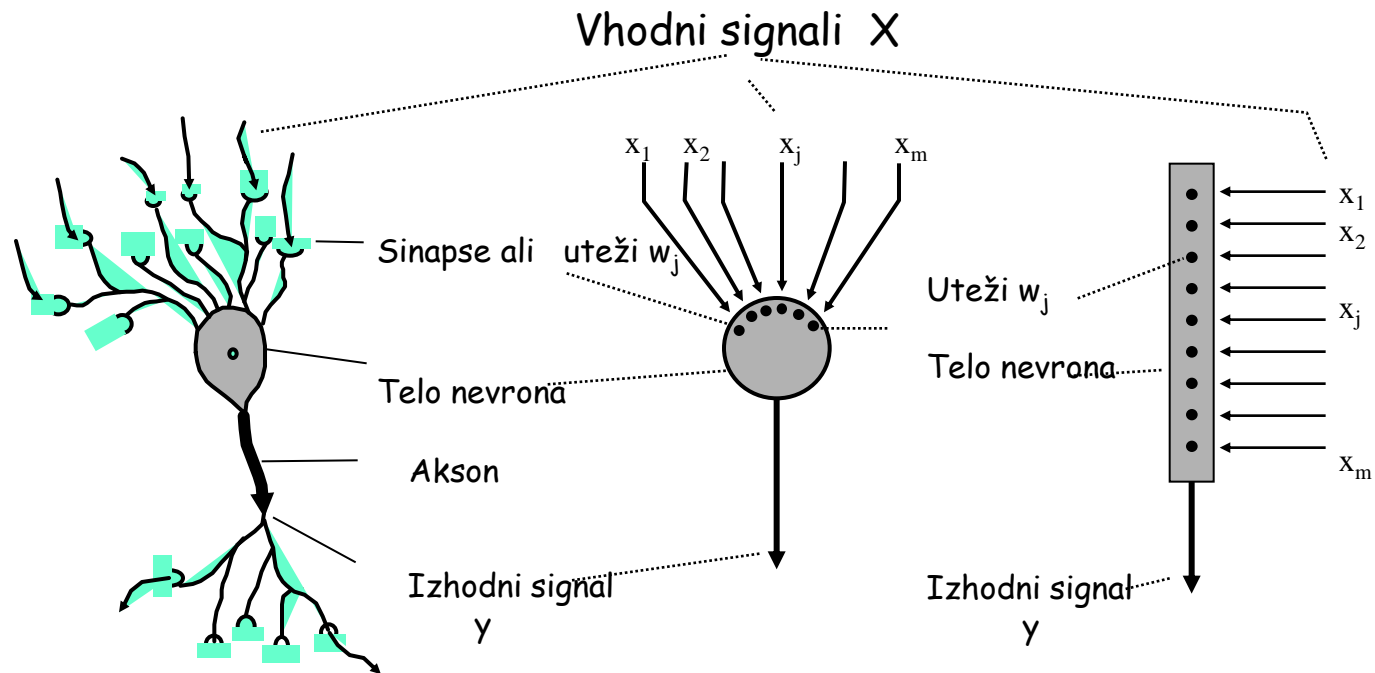
[†]To whom correspondence should be addressed.

We describe a new learning procedure, back-propagation, for networks of neurone-like units. The procedure repeatedly adjusts the weights of the connections in the network so as to minimize a measure of the difference between the actual output vector of the net and the desired output vector. As a result of the weight adjustments, internal 'hidden' units which are not part of the input or output come to represent important features of the task domain, and the regularities in the task are captured by the interactions of these units. The ability to create useful new features distinguishes back-propagation from earlier, simpler methods such as the perceptron-convergence procedure[†].

References

1. Rosenblatt, F. *Principles of Neurodynamics* (Spartan, Washington, DC, 1961).
2. Minsky, M. L. & Papert, S. *Perceptrons* (MIT, Cambridge, 1969).
3. Le Cun, Y. *Proc. Cognitiva* **85**, 599–604 (1985).
4. Rumelhart, D. E., Hinton, G. E. & Williams, R. J. in *Parallel Distributed Processing: Explorations in the Microstructure of Cognition*. Vol. 1: *Foundations* (eds Rumelhart, D. E. & McClelland, J. L.) 318–362 (MIT, Cambridge, 1986).

Predstavitev nevronov



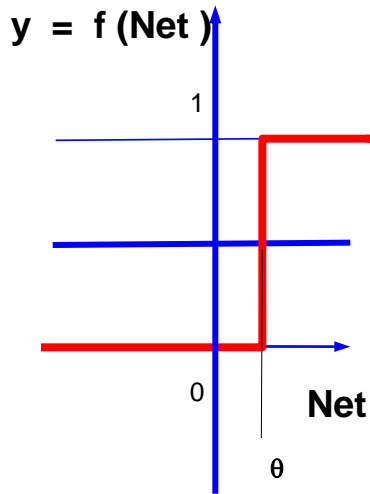
Izhodni signali nevronov

“Error Back Propagation” nevronske mreže (perceptron)

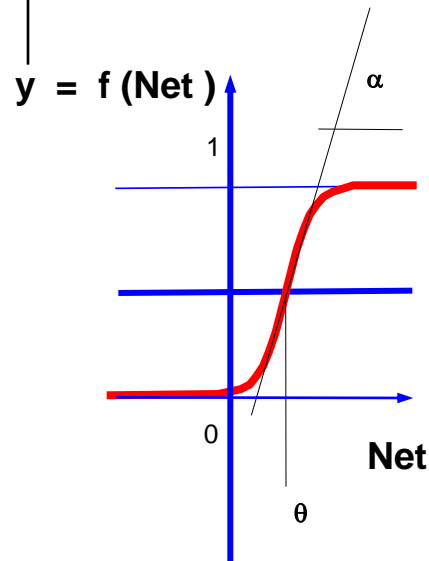
$$\text{Net}_j = \sum_{i=1,k} w_{ji} X_i$$

$$y = \frac{1}{1 + e^{-\alpha(\text{Net} - \theta)}}$$

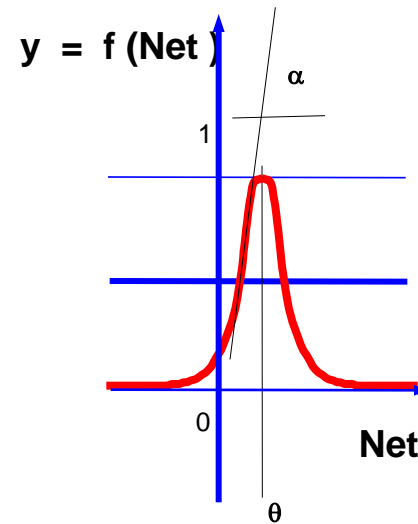
$$Y = \text{signal} = \text{out}$$



a)

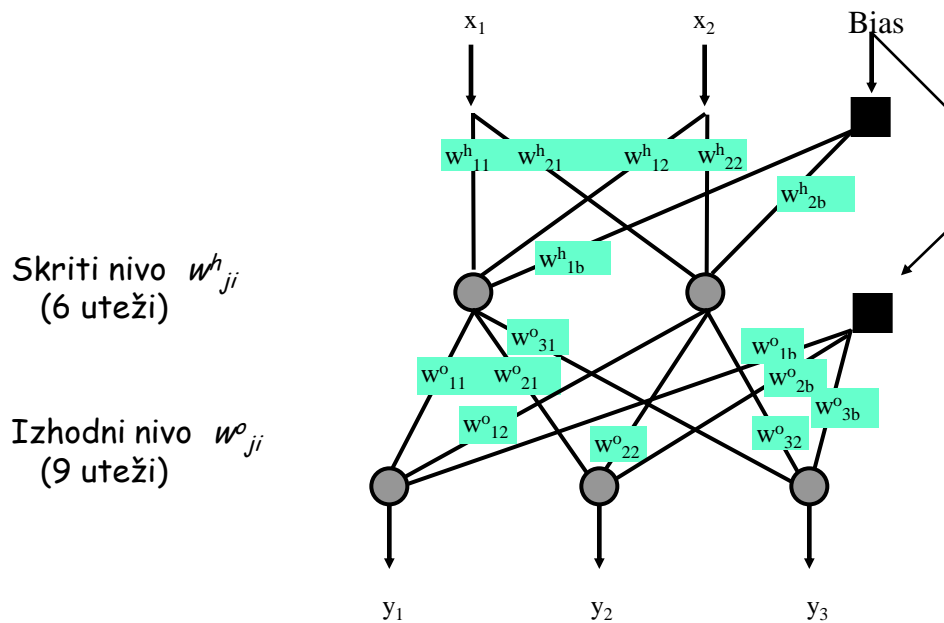
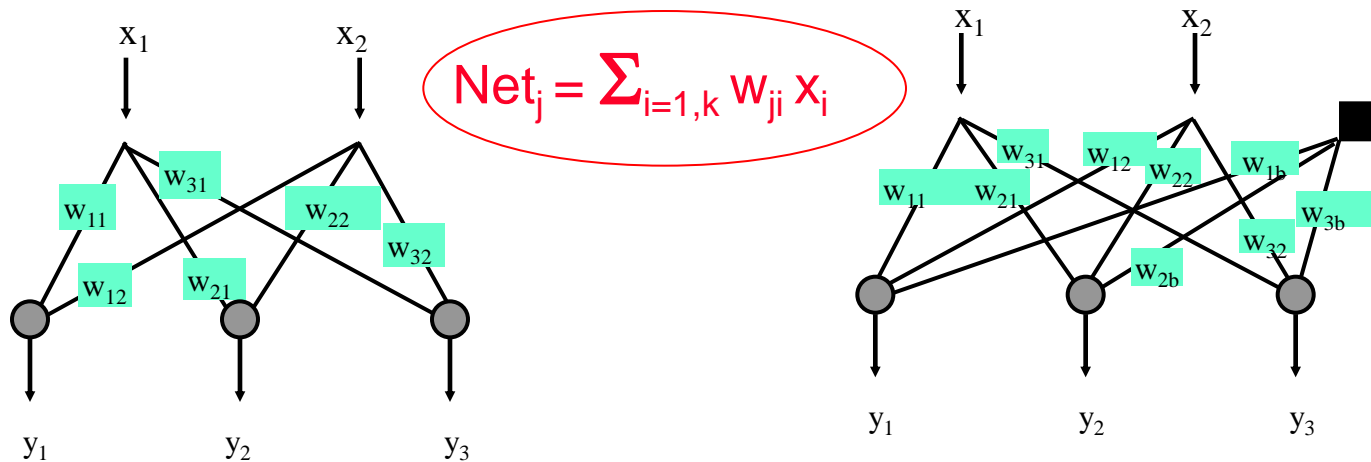


b)



c)

Različne oblike EBP nevronskih mrež



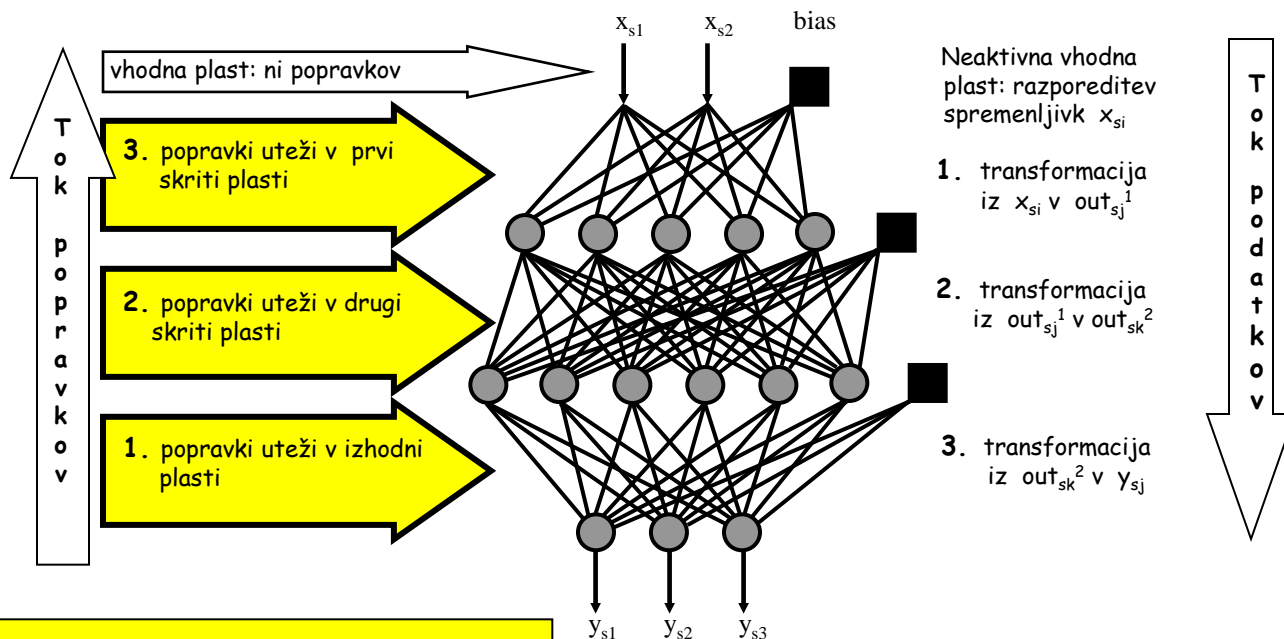
Popravljanje uteži v nevronske mreži z vzratnim širjenjem napake

$$\Delta w_{ji}^l = \eta \delta_j^l \text{out}_j^{l-1} + \mu \Delta w_{ji}^{l, \text{prejšnji}} \quad \text{signal} = \text{out}$$

$$\text{signal} = \frac{1}{1 + e^{-\alpha(\text{Net} - \theta)}}$$

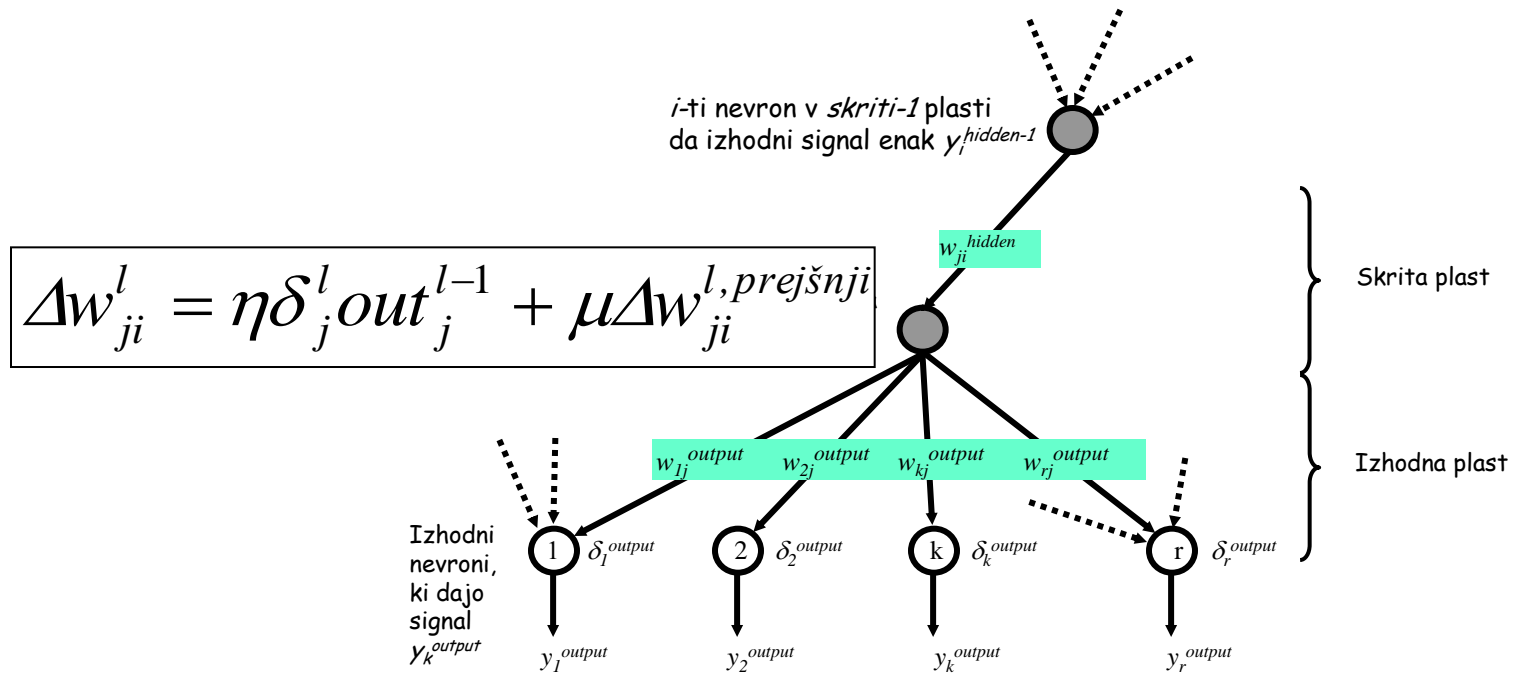
$$\delta_j^{\text{hidden}} = \left(\sum_{k=1}^{n_r} \delta_k^{\text{output}} w_{kj}^{\text{output}} \right) y_j^{\text{hidden}} (1 - y_j^{\text{hidden}})$$

$$\text{Net}_j = \sum_{i=1, k} w_{ji} x_i$$



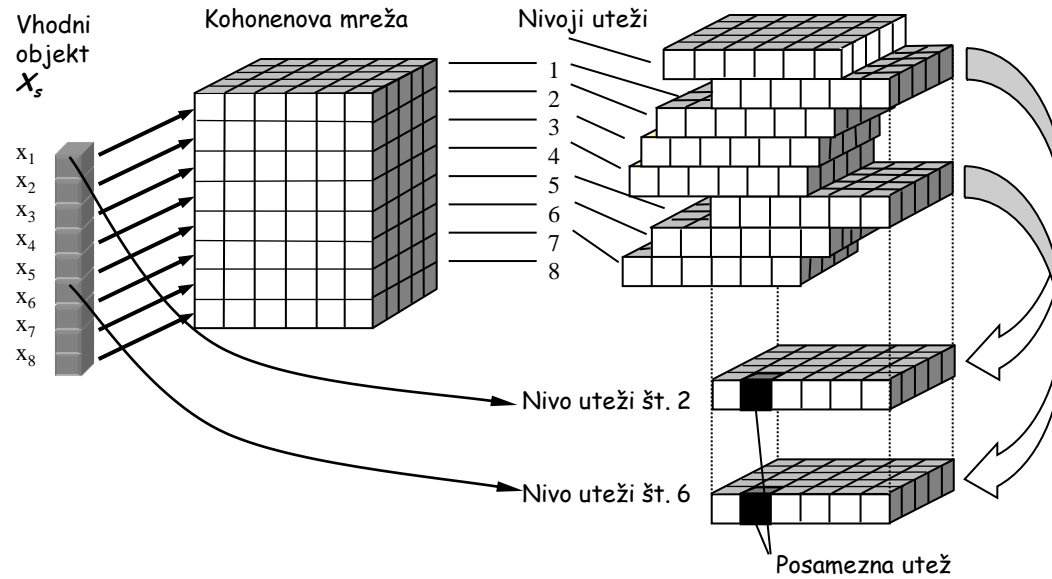
$$\delta_j^{\text{output}} = (t_j - y_j^{\text{output}}) y_j^{\text{output}} (1 - y_j^{\text{output}})$$

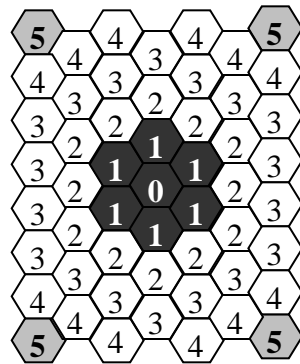
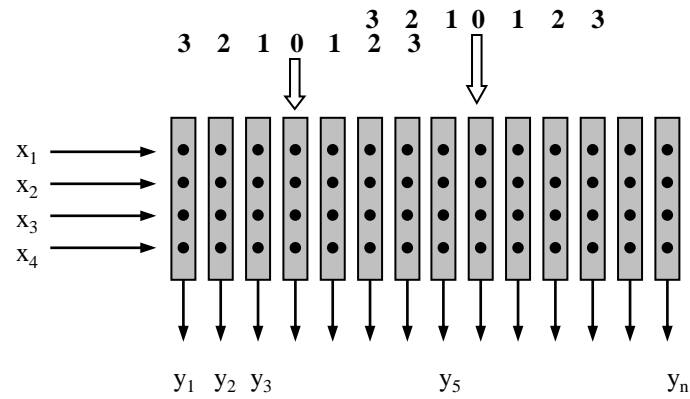
V izračunu poravka vsake uteži upoštevamo podatke iz treh plasti nevronov



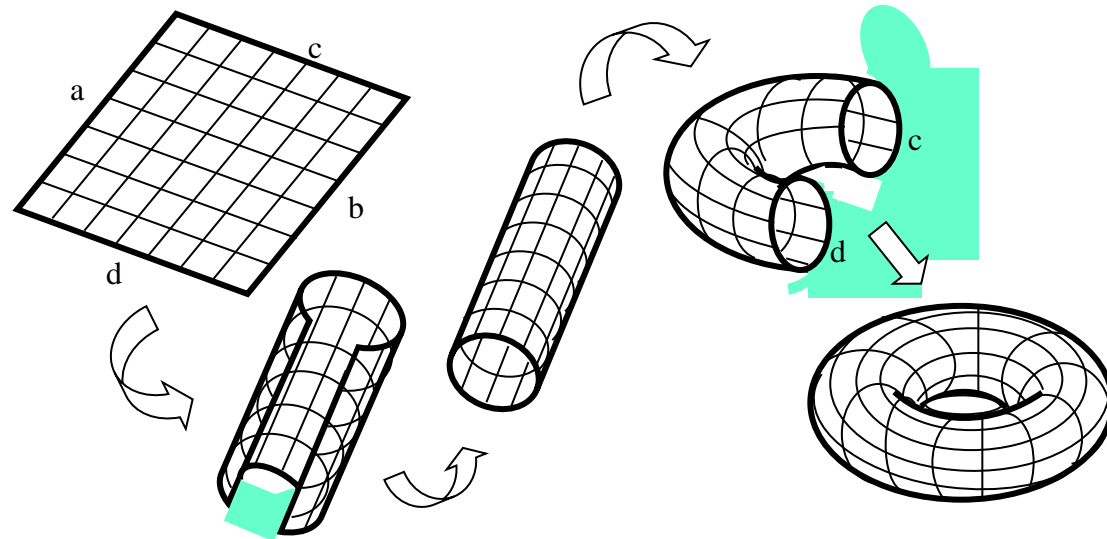
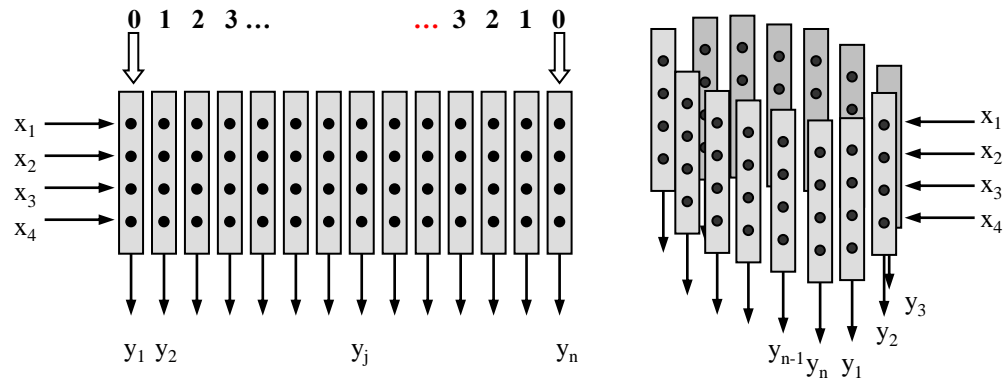
$$\delta_j^{hidden} = \left(\sum_{k=1}^{n_r} \delta_k^{output} w_{kj}^{output} \right) y_j^{hidden} (1 - y_j^{hidden})$$

Kohonenova nevronska mreža

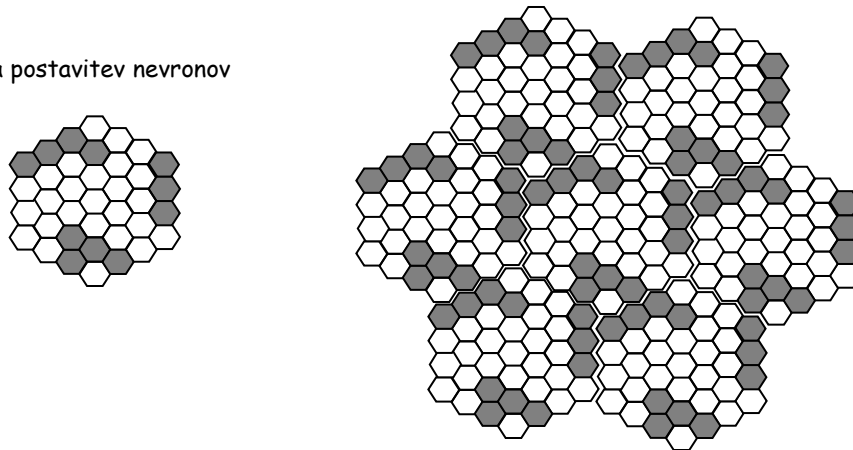




3	3	3	3	3	3	3
3	2	2	2	2	2	3
3	2	1	1	1	2	3
3	2	1	0	1	2	3
3	2	1	1	1	2	3
3	2	2	2	2	2	3
3	3	3	3	3	3	3

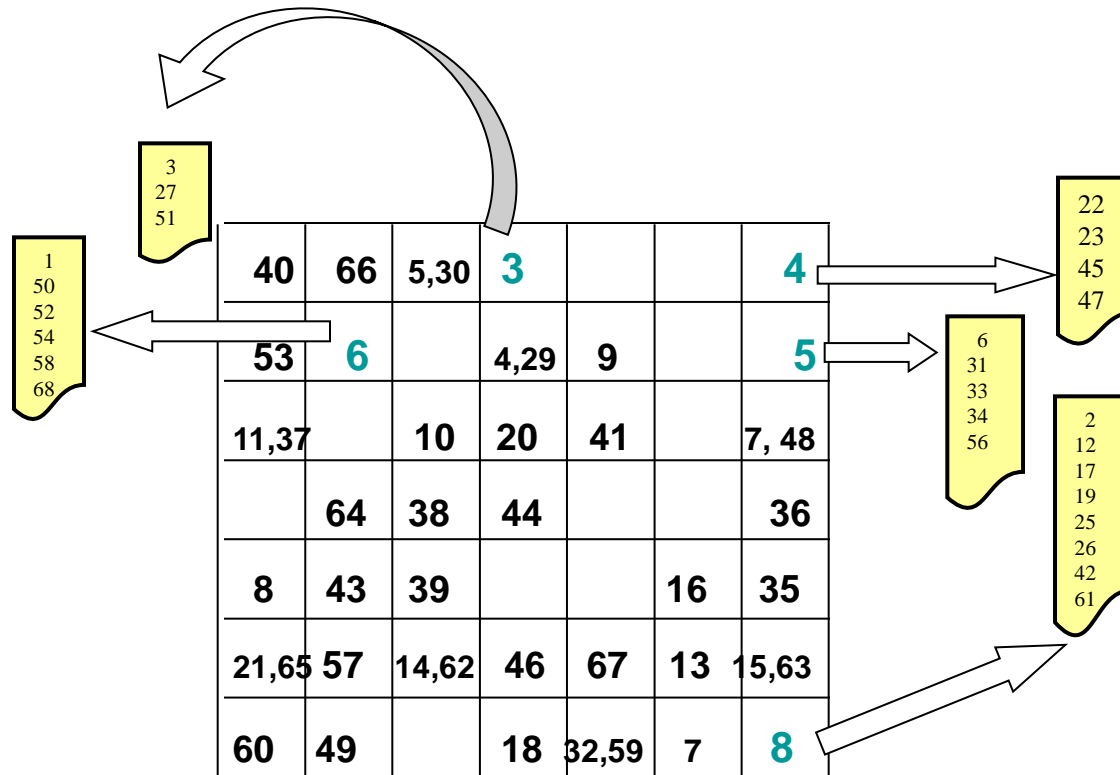


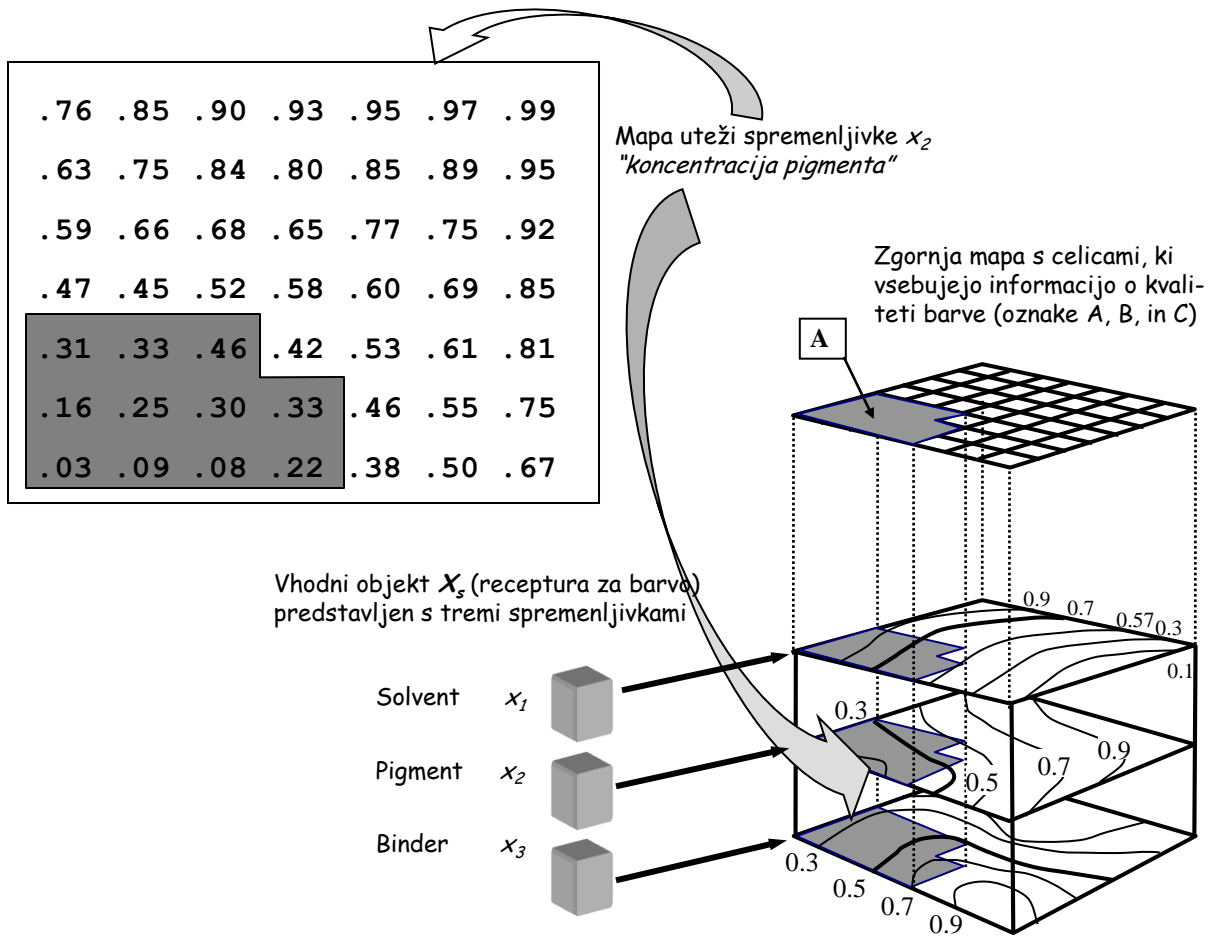
Heksagonalna postavitev nevronov



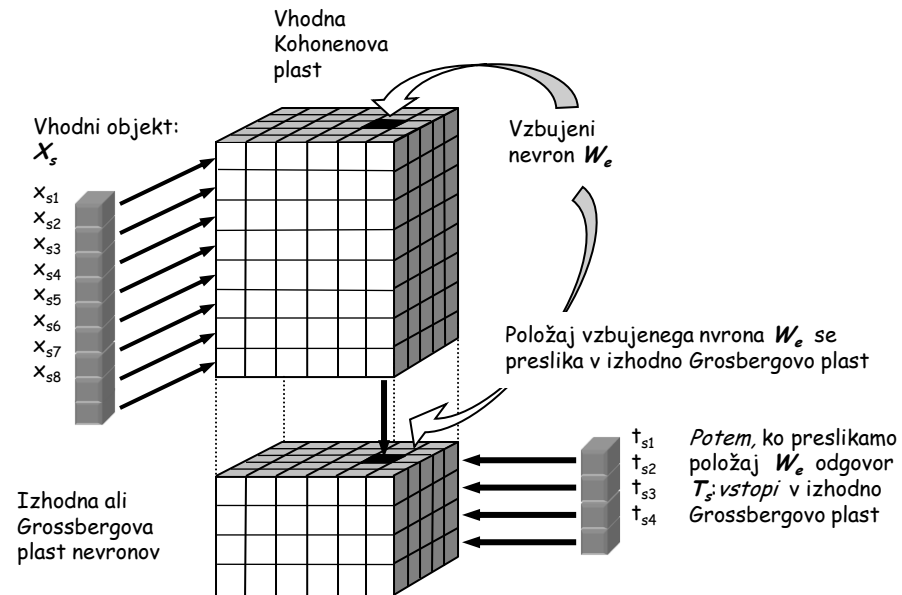
1	1	2	3			4
1	6		2	1		5
2		1	1	1		2
	1	1	1			1
1	1	1		1		1
2	1	2	1	1	1	2
1	1		1	2	2	8

A	A	A	A,C			B
A	A		A,C	C		B
A		C	C	C		B
	C	C	C			B
C	C	C			B	B
C	C	C,B	B	B	B	B
C	C		B	B	B	B

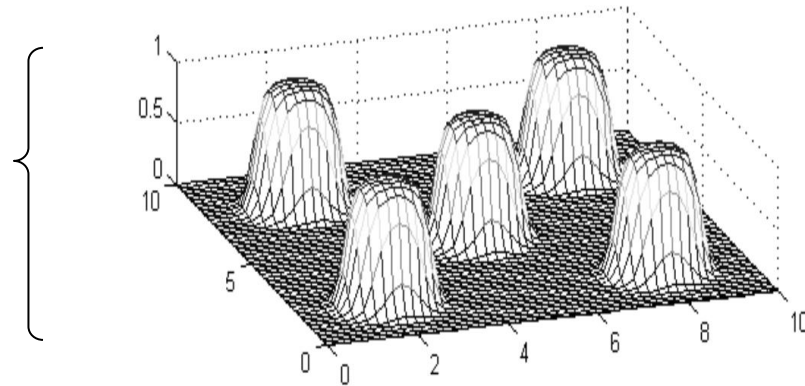
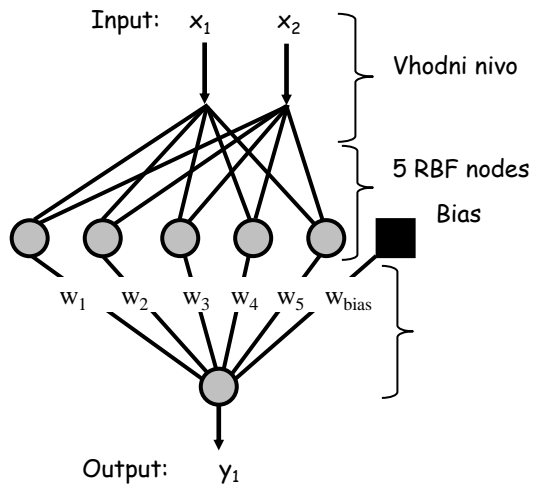
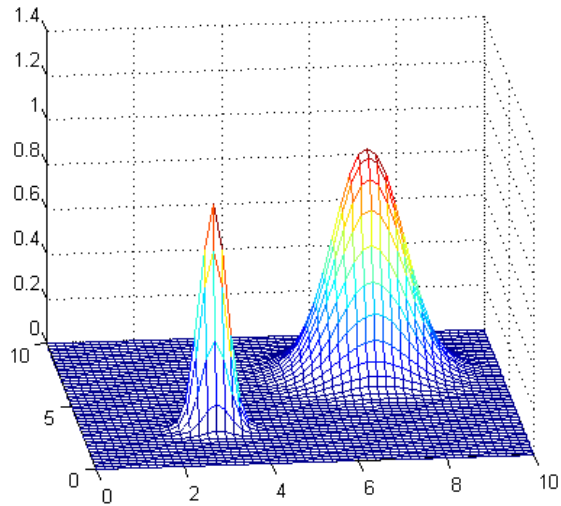


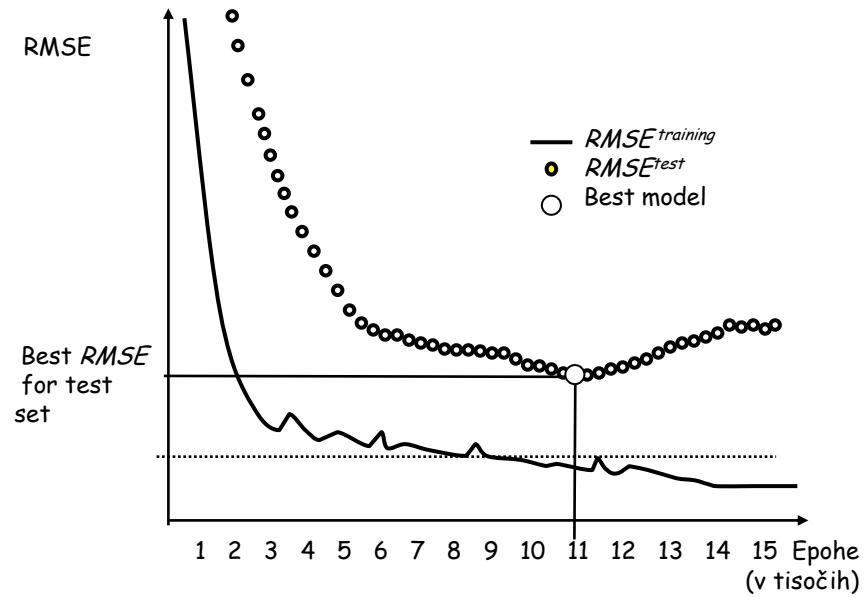


Protitočna (counterpropagation) nevronska mreža

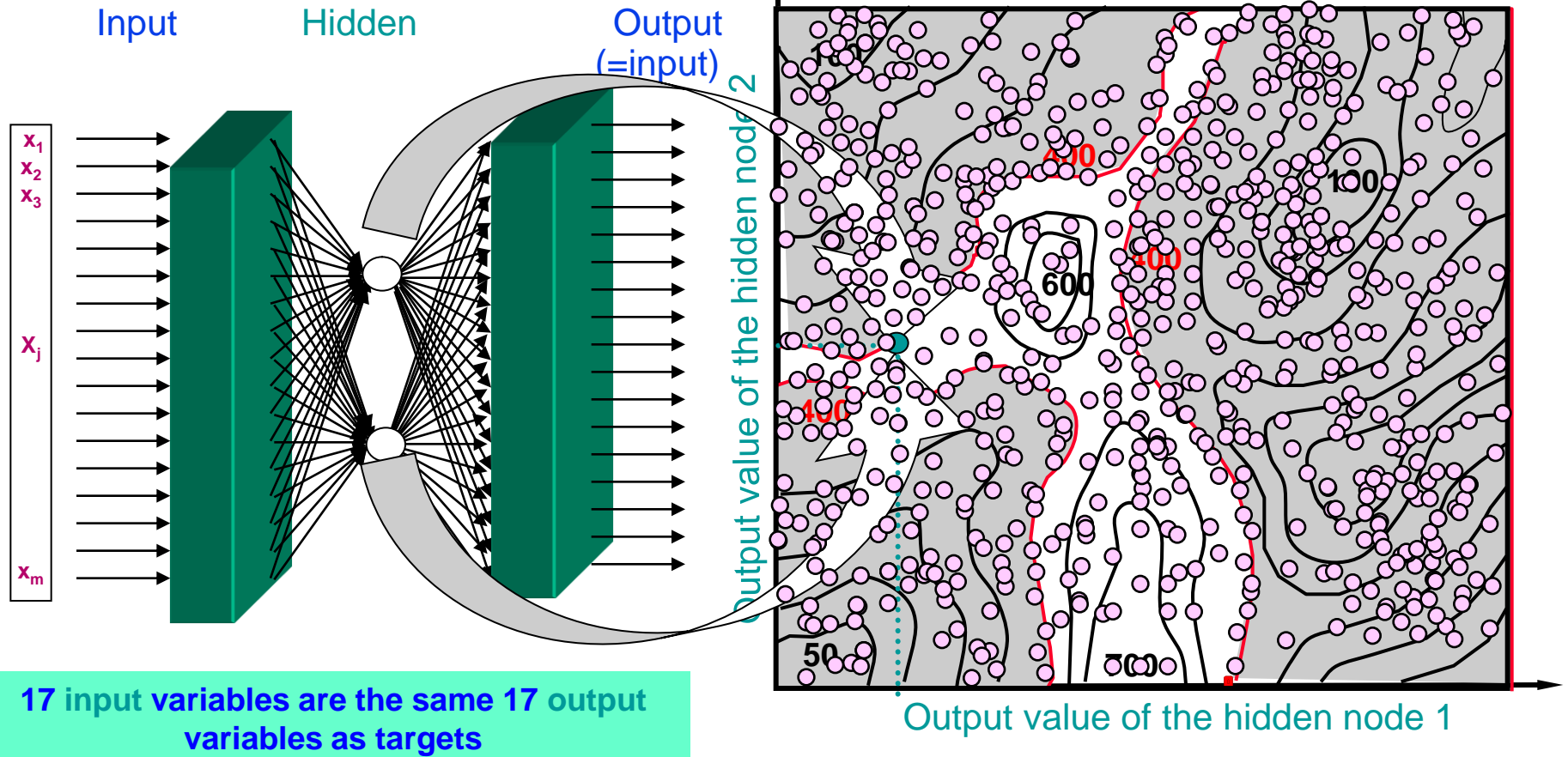


"Radial Basis Function" neuronske mreže





Concentration of SO₂ [mg/m³]



17 input variables are the same 17 output variables as targets

KOHONENOVE IN PROTITOČNE (COUNTERPROPAGATION) NEVRONSKE MREŽE

Študijska literatura

1. J. Zupan, J. Gasteiger, *Neural Networks in Chemistry and Drug Design*, Wiley-VCH, Weinheim, 1999
2. J. Zupan, *Računalniške metode za kemike*, DZS, Ljubljana, 1992
3. Teach/Me software, Hans Lohninger, Springer Verlag Berlin 1999
4. T. Kohonen, *Self-Organizing Maps*, Springer-Verlag Berlin 1995
5. R. Hecht-Nielsen, "Counterpropagation networks", *Applied Optics*, 26, 4979-4984, 1987
6. R. Hecht-Nielsen, "Applications of counterpropagation networks", *Neural Networks*, 1, 131-139, 1988
7. R. Hecht-Nielsen, *Neurocomputing*, Reading, MA: Addison-Wesley, 1990
8. J. Zupan, M. Novič, I. Ruisánchez. Kohonen and counterpropagation artificial neural networks in analytical chemistry : tutorial. *Chemometr. intell. lab. syst.*, 1997, vol. 38, str. 1-23.

Vsebina:

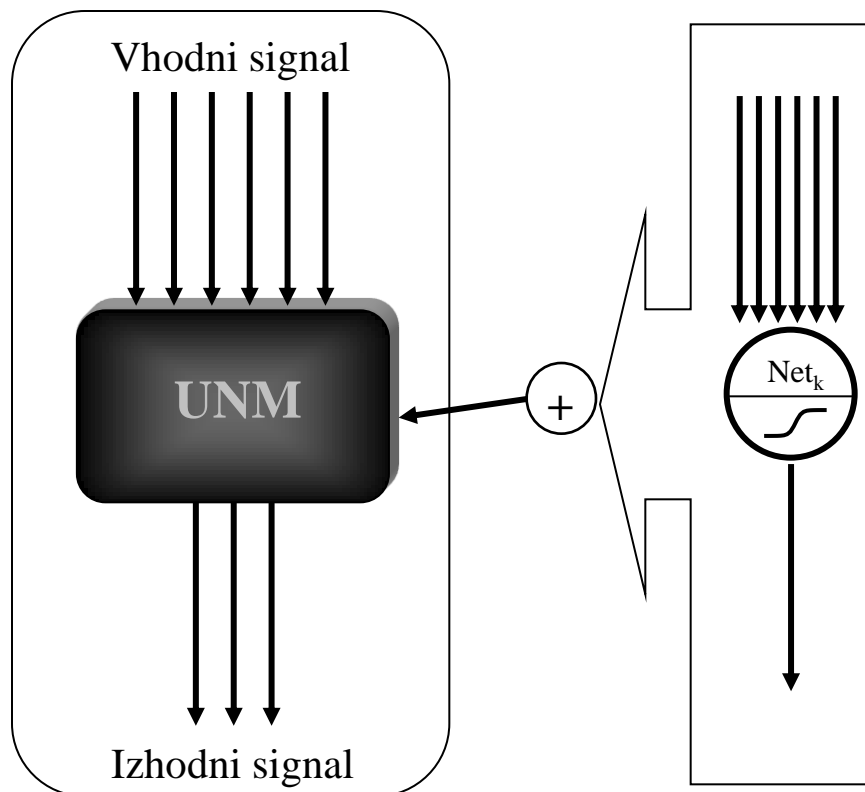
- **Osnovna struktura umetnih nevronske mreže**
- **Kohonenove umetne nevronske mreže (K-UNM)**
- **Protitočne (Counterpropagation) umetne nevronske mreže**
- **2-D preslikava (mapiranje) s Kohonenovo UNM**
- **Klasifikacija**
- **Modeliranje**
- **Primeri uporabe**
 - **Mapiranje IR spektrov**
 - **Modeli za napovedovanje toksičnosti ($\log(1/LD50)$ za *Tetrahymena pyroformis*), preko 200 hidroksi-substituiranih aromatskih spojin**

Umetne nevronske mreže (UNM) kot črna skrinja pri odločitvah

- **vhodni signali**
- **izhodni signali**
- **strategije učenja**
 - **nenadzorovano**
 - **nadzorovano**

UNM kot črna skrinja pri odločitvah

Razpoznavanje vzorcev, določitev lastnosti, kontrola procesov...



Vhodni signal:

$$\mathbf{X}=(x_1,x_2,\dots,x_i,\dots,x_m)$$

UNM postane uporabna šele potem, ko jo naučimo naših podatkov.

Izhodni signal:

$$\mathbf{Y}=(y_1,y_2,\dots,y_j,\dots,y_n)$$

Nenadzorovano učenje

Razmerje med objektom in tarčo ni vnaprej definirano.

Objekt

$\mathbf{X}=(x_1, x_2, \dots, x_i, \dots, x_m)$

Tarča

$\mathbf{Y}=(\text{ni poznana})$

Nenadzorovano učenje

Primer: Izvor italjanskih oljčnih olj

Objekt: $\mathbf{X}=(x_1,x_2,\dots,x_i,\dots,x_8)$ **572 vzorcev**
Tarča: Y (ni poznana)

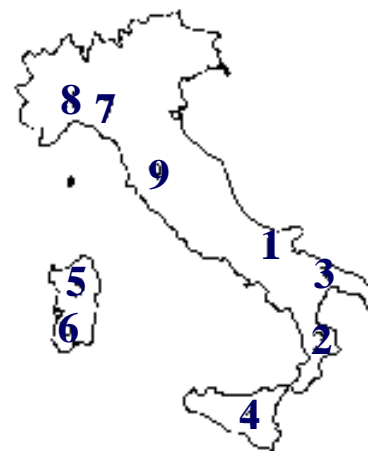
$x_1\dots x_8$: % maščobnih kislin:

- | | |
|--------------------|-----------------------------|
| (1)palmitinska, | (5)linoleinska, |
| (2)palmitoleinska, | (6)arašidna (eikosanoična), |
| (3)stearinska, | (7)linolenska, |
| (4)oleinska, | (8)eikosenoična |

6	6	6	6	6	5	5	5	5	5	5	5	8	8	8	8	8	8	8	
6	6	6	6			5	5		5	5	5	7		8	8	8		8	
6	6	6	6		5	5	5	5	5	5		7		8	8	8	8	8	
6	6	6	6	5		5	5	5	5	5		7	7	7	7	8	8	8	8
			6	6	5	5	5	5		7		7	7	7	7	7		8	8
3	3				5	5	5		7	7	7		9	9	9	9		8	
3	3				5	5	5		7	7	7		9	9	9	9			
3	3				5	5		7	7	7	7		9	9	9	9			
3	3			3				7	7	7	7		9	9	9				1
3	3	3	3	3	3	3			7	7	7	9					1	4	1
3	3	3	3	3	3	3	2	2				4		2	1	1	1	1	1
3	3	3	3	3	3	3	3	3		2	2	2	2	2	2	1		1	1
3	3	3	3	3	3	3	3	3				2	2			1	1	1	
3		3			3	3	3		3	2	2	2		2		2	4	4	
3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	2		2		2	2		
	3		3	3	3	3	3	3	3	3	3	2		2	2	4		4	4
3	3	3		3	3	3	3	3	3	3	3	3	4	2	2	4	4	4	4
3	3	3	3		3		3	3	3	3		4		2			2	2	2
3	3		3		3	3	3	3		3	4	4	3	4	4	2	2	2	2
3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3		3	4	4	4	2	2	2	4

Razred	Pokrajina	Število vzorcev
1	North Apulia	25
2	Calabria	56
3	South Apulia	206
4	Sicily	36
5	Inner Sardinia	65
6	Coastal Sardinia	33
7	East Liguria	50
8	West Liguria	50
9	Umbria	51
	Σ	572

J. Zupan, M. Novic, X. Li, J. Gasteiger,
 Classification of Multicomponent
 Analytical Data of Olive Oils Using
 Different Neural Networks, Anal. Chim.
 Acta, 292, (1994), 219-234.



Nadzorovano učenje

Razmerje med objektom in tarčo je poznano vnaprej, kar pomeni, da za poljuben objekt natančno vemo, katera tarča mu pripada oziroma jo želimo doseči.

Objekt

$$X=(x_1,x_2,\dots,x_i,\dots,x_m)$$

Tarča

$$Y=(y_1,y_2,\dots,y_j,\dots,y_n)$$

Nadzorovano učenje

Primer: Klasifikacija točk glede na kvadrante v kartezičnem koordinatnem sistemu

Objekt: $\mathbf{X}=(x_1,x_2,\dots,x_i,\dots,x_m)$

Tarča: $\mathbf{Y}=(y_1,y_2,\dots,y_j,\dots,y_n)$

m=2

n=1

n=4

$X=(1, 1)$

$Y=1$

$Y=(1,0,0,0)$

$X=(-1, 1)$

$Y=2$

$Y=(0,1,0,0)$

$X=(-1,-1)$

$Y=3$

$Y=(0,0,1,0)$

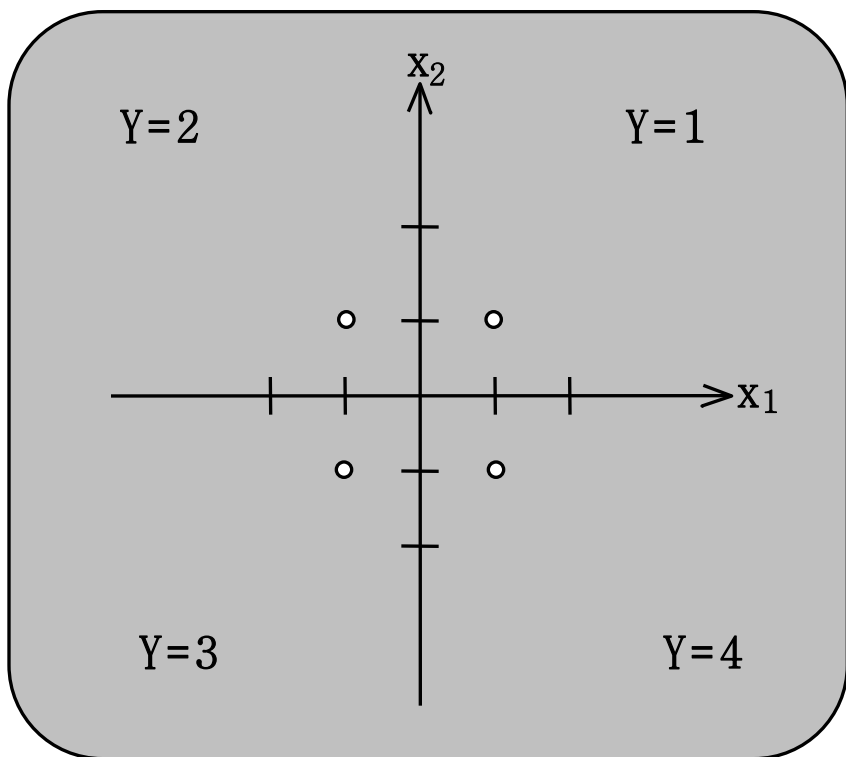
$X=(1,-1)$

$Y=4$

$Y=(0,0,0,1)$

Nadzorovano učenje

Primer



$$\mathbf{X}=(x_1, x_2) \quad \mathbf{Y}=(y_1, y_2, y_3, y_4)$$

$$n=1$$

$$n=4$$

$$\mathbf{Y}=1$$

$$\mathbf{Y}=(1, 0, 0, 0)$$

$$\mathbf{Y}=2$$

$$\mathbf{Y}=(0, 1, 0, 0)$$

$$\mathbf{Y}=3$$

$$\mathbf{Y}=(0, 0, 1, 0)$$

$$\mathbf{Y}=4$$

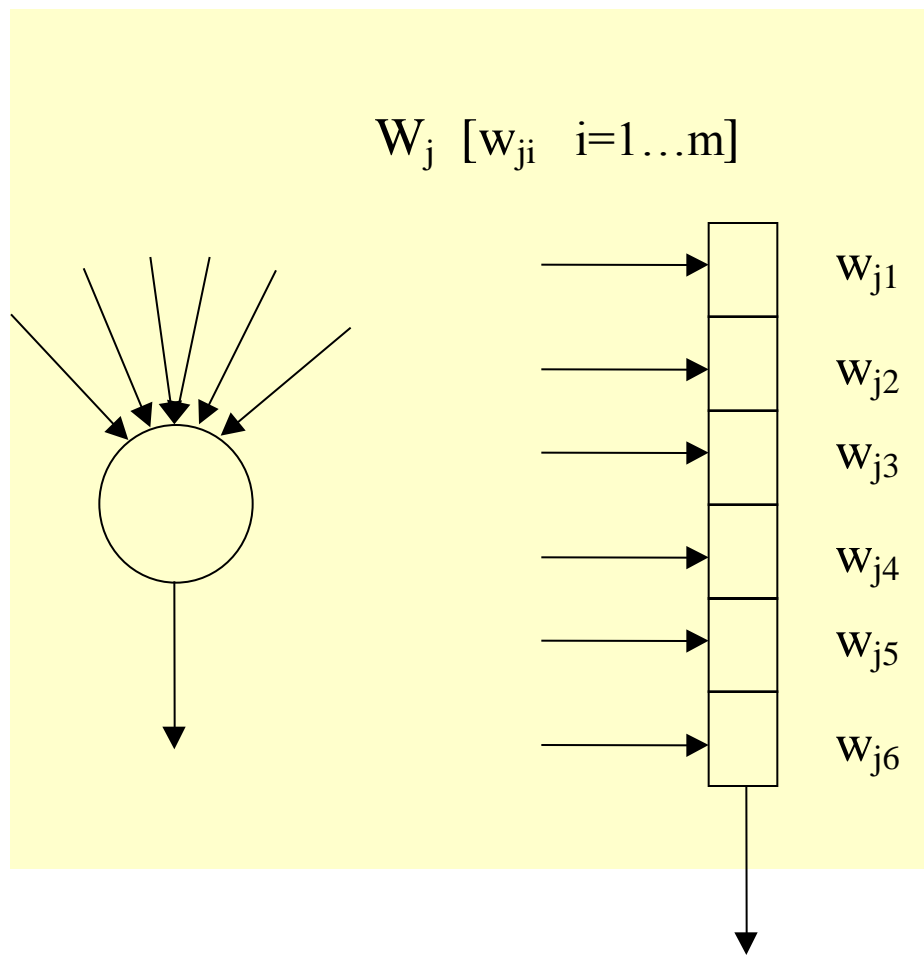
$$\mathbf{Y}=(0, 0, 0, 1)$$

Osnove Kohonenovih umetnih nevronske mreže

- organizacija nevronov
 - 1-dimenzionalna (v vrsti)
 - 2-dimenzionalna (v ravnini)
- analogija Kohonenove UNM z možgani
- učna strategija - “zmagovalec dobi vse”
- parameteri hitrosti učenja
- velikost in obseg popravkov uteži
 - krčenje območja sosedov
- razpoznavanje objektov iz učnega niza
- napoved “neznanih” objektov
- vrhnja plast VP (“top-layer”) z oznakami
 - prazni prostori v VP
 - klastri v VP
 - konflikti v VP
- nivoji uteži

Nevron je definiran kot niz uteži

W_j j -ti nevron; w_{ji} i -ta utež j -tega nevrona



Organizacija nevronov

$$W_j \quad j=1,n$$

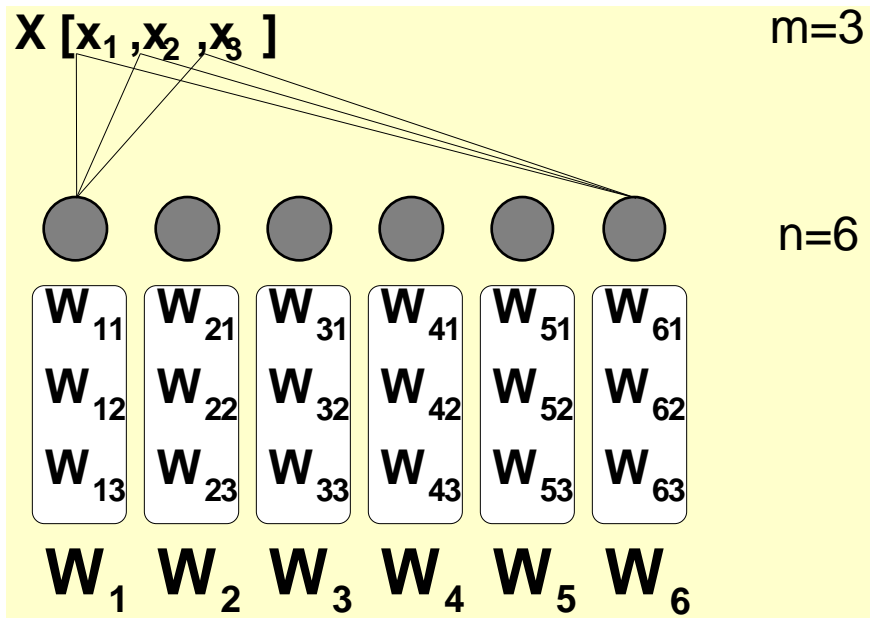
$$w_{ji}, \quad i=1,m$$

n: število nevronov

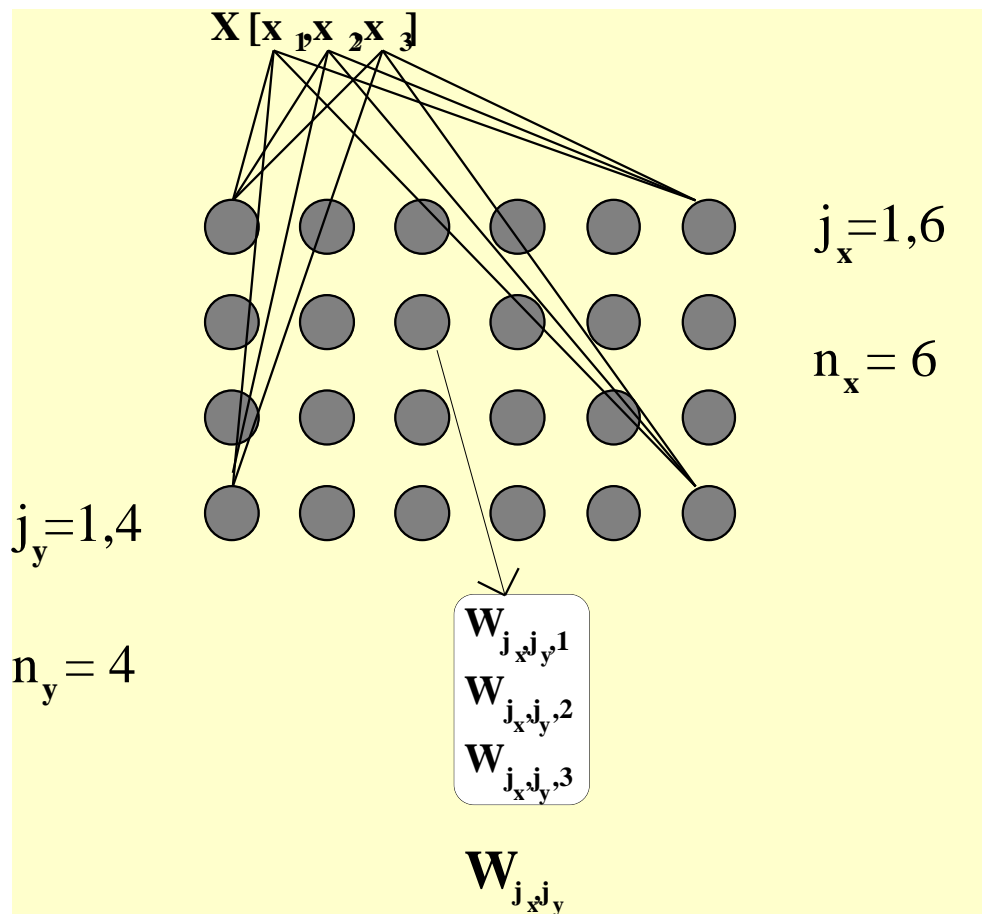
m: dimenzija nevronov

Dimenzija nevronov *m* mora biti enaka dimenziji reprezentacije objektov (število neodvisnih spremenljivk)!

1-dimenzionalna organizacija nevronov (v vrsti)



2-dimenzionalna organizacija nevronov (v ravnini)



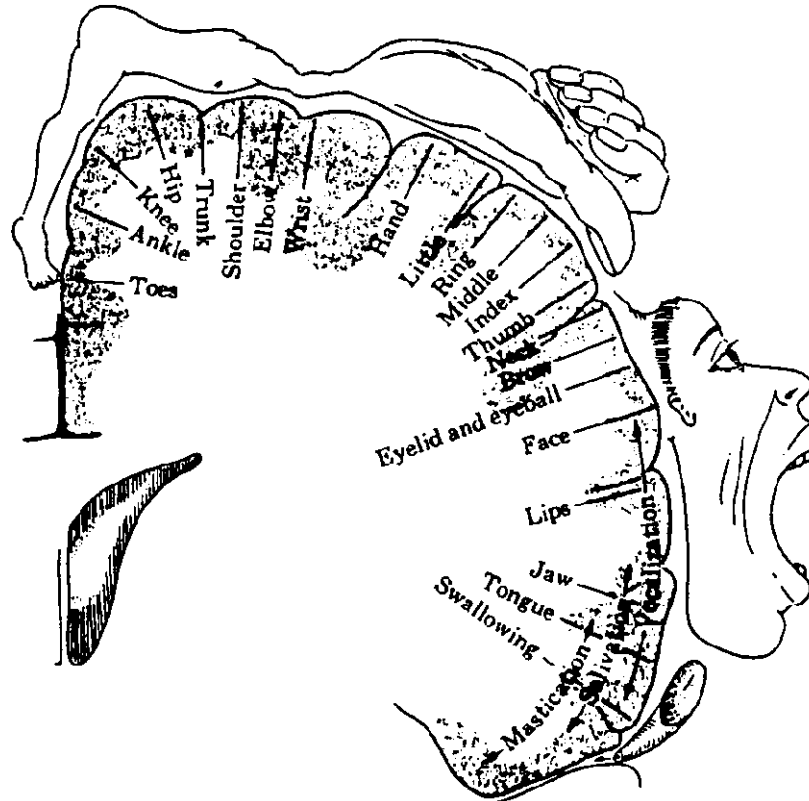
Število
nevronov je
 $n = n_x \cdot n_y = 24$
 (6x4)

Kohonenove nevronske mreže lahko uporabljamo za nelinearne projekcije **več**-dimenzionalnih objektov v **dvo**-dimenzionalen prostor – ravnino (mapiranje)

"homunculus"

V možganih so področja nevronov, ki kontrolirajo gibanje – motoriko posameznih delov človeškega telesa, organizirana eno zraven drugega, kot na navideznem zemljevidu človeškega telesa. Vendar velikost posameznih področij ne ustreza velikosi organa, katerega gibanje kontrolira. Velikost področja je sorazmerna pomembnosti in kompleksnosti njegovih aktivnosti.

"homunculus"



Strategija učenja - "zmagovalec dobi vse"

$$\text{Winner} = W_{\text{win}} \leftarrow \min (\varepsilon_j)$$

$$\varepsilon_j = \sum_{i=1}^m (x_i - w_{ji})^2$$

x_i \leftarrow objekt - komponente vektorja X

w_{ji} \leftarrow j^{ti} nevron – komponente vektorja W (uteži)

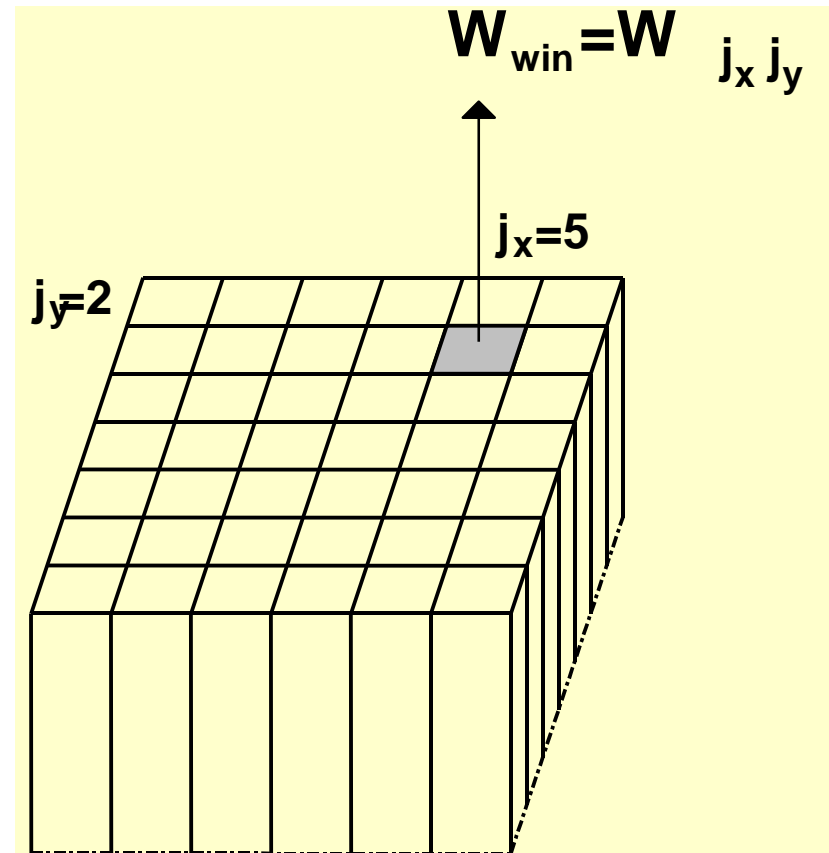
ε_j \leftarrow razlika med objektom in j^{tim} nevronom

Analogija med biološkim in simuliranim nevronom:

Signal vzbudi en sam nevron v celem šopu realnih, bioloških nevronov.

V računalniški simulaciji je vzbujeni (zmagovalni) nevron W_{win} določen s koordinato svojega položaja v UNM

$$W_{win} = W_{j_x j_y}$$



POPRAVLJANJE:

“zmagovalni” nevron + okoliški nevroni

Parameter hitrosti učenja: $\eta(\mathbf{t}, \mathbf{r}(\mathbf{t}))$

\mathbf{t} : čas učenja

$\mathbf{r}(\mathbf{t})$: okolica (sosedni nevroni)

$$W_{ji}^{novi} = W_{ji}^{stari} + \eta(x_{si} - W_{ji}^{stari})$$

$$i=1, m$$

$$j=1, n$$

$$s=1, p$$

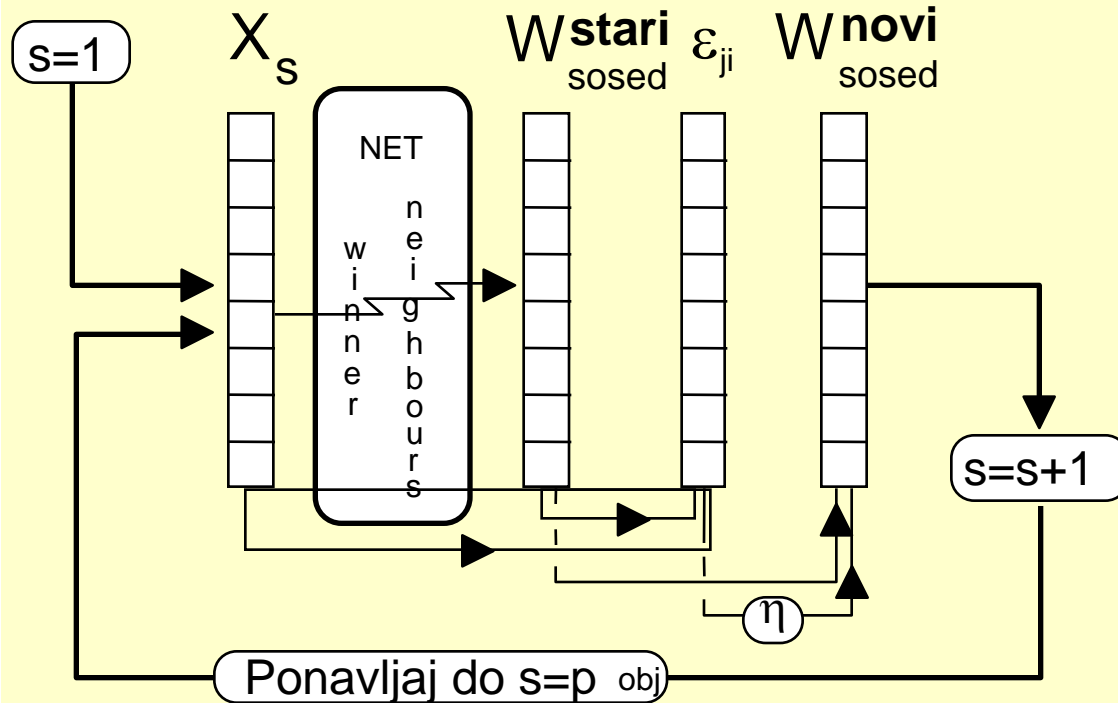
Proces, v katerem popravimo zmagovalni nevron in ustrezne okoliške nevrone glede na en sam (s^{ti}) objekt, imenujemo ena **iteracija** učnega procesa.

Potem ko skozi mrežo pošljemo enega za drugim vse objekte (p) in naredimo ustrezne popravke uteži, pravimo, da smo zaključili eno učno epoho.

p iteracij = 1 epoha

Ena epoha učenja Kohonenove mreže

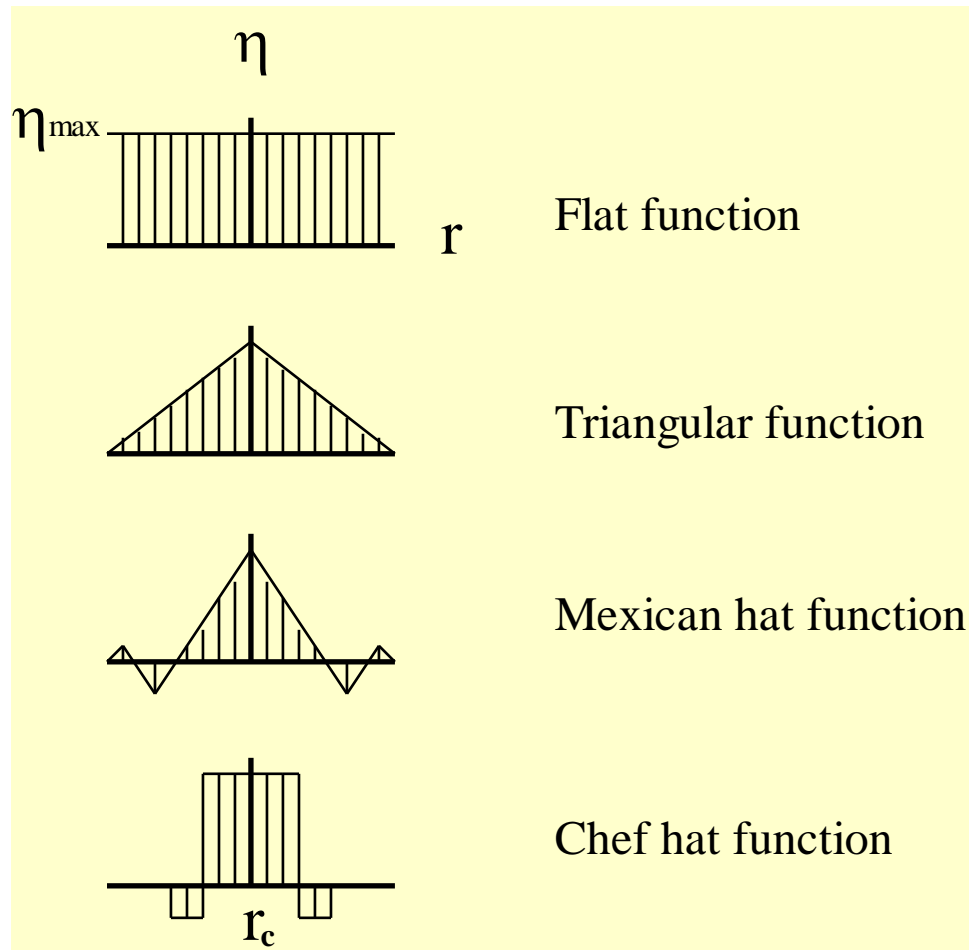
$$\varepsilon = X_s - W_{\text{sosed}}^{\text{stari}}$$

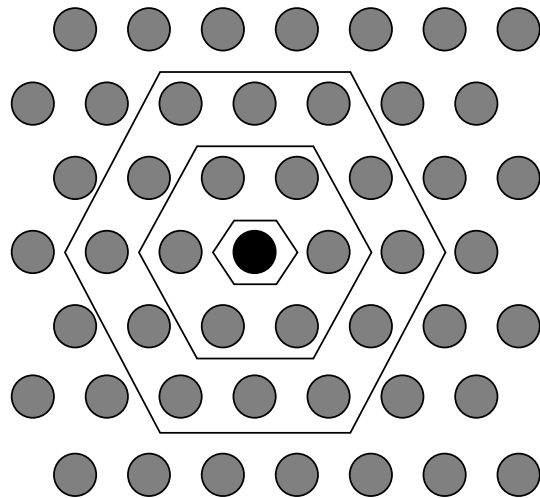
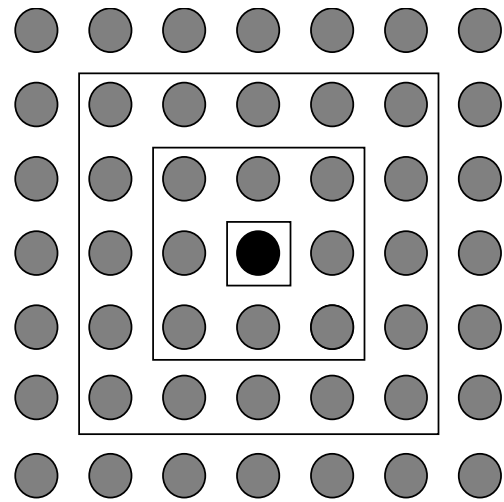


$$W_{ji}^{\text{novi}} = W_{ji}^{\text{stari}} + \eta(x_{si} - W_{ji}^{\text{stari}})$$

p : število objektov v učnem nizu

Velikost in obseg popravkov:
Krčenje obsega sosedov





Razpoznavanje objektov iz učnega niza

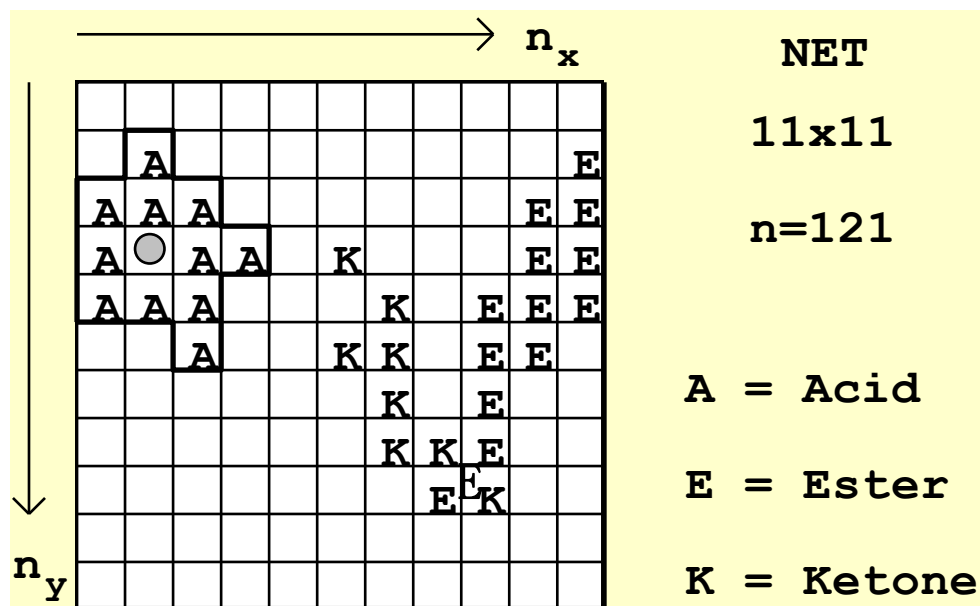
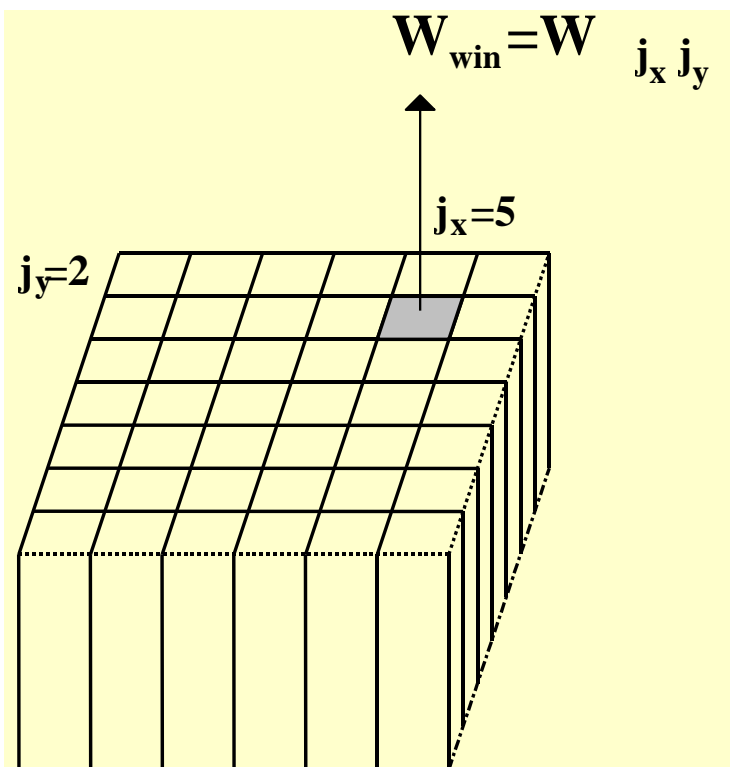
Ko je učenje končano, morajo biti vsi objekti iz učnega niza razpoznavni

Zgornji pogoj je praviloma dosežen, ko je vsota napak v eni epohi ε_{epoh} pod določeno mejo.

$$\varepsilon_{epoh} = \sum_{s=1}^p \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^m (x_{si} - w_{ji})^2$$

Vrhnja plast (VP) z oznakami:

- prazni nevroni v VP
- klastri v VP
- konflikti v VP



Modifikacija Kohonenove UNM

Dodatna plast izhodnih nevronov spremeni Kohonenovo v “protitočno” (“counterpropagation”) umetno nevronska mrežo

Objekt je sestavljen iz opisnega vektorja X (neodvisni) in lastnosti - Y (vektor odvisnih spremenljivk ali tarče)

- **Vhodni nevroni W (vhodna ali Kohonenova plast)**
- **Izhodni nevroni O (izhodna ali Grosbergova plast)**
- **Določanje zmagovalnega nevrona samo v vhodni plasti glede na podobnost med X in W**
- **Popravljanje uteži v obeh plasteh na enak način, glede na razliko med $X-W$ in $Y-O$**

Kohonenova - vhodna plast

$$w_{ji}^{new} = w_{ji}^{old} + \eta(x_{si} - w_{ji}^{old})$$

$$i=1, m$$

$$j=1, n$$

$$s=1, p$$

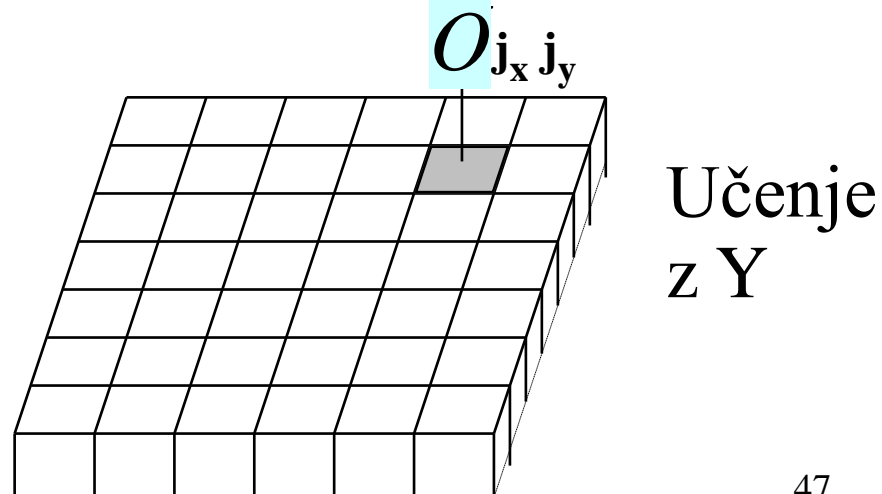
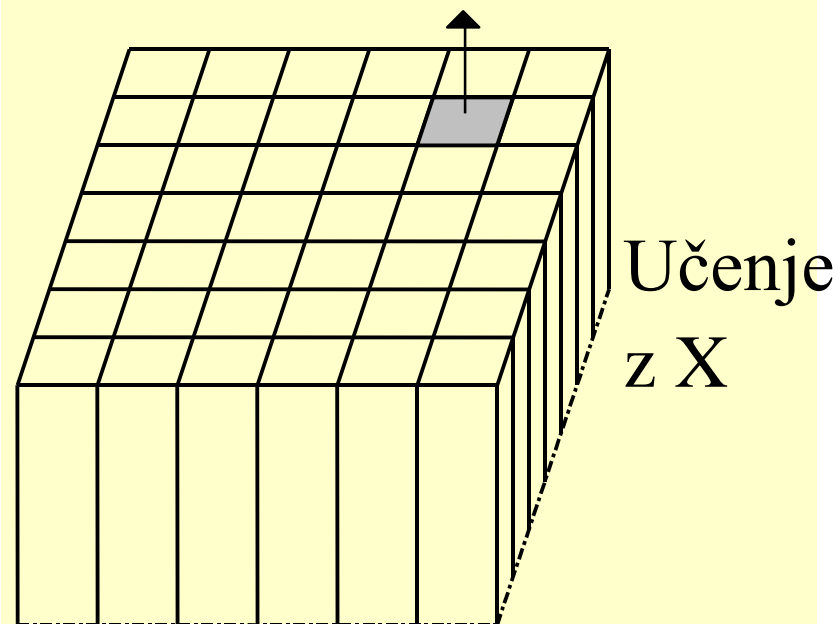
Izhodna plast

$$o_{ji}^{new} = o_{ji}^{old} + \eta(y_{si} - o_{ji}^{old})$$

$$i=1, t$$

$$j=1, n$$

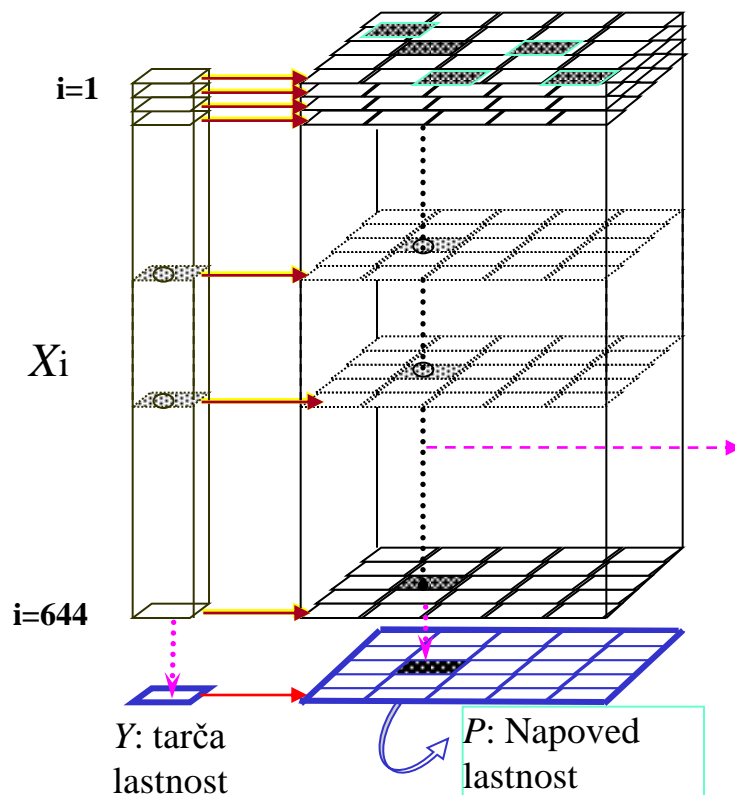
$$s=1, p$$



Protitočna (counterpropagation) mreža (CP-UNM)

X : reprezentacija
molekulske strukture

CP ANN
 $j_x \times j_y$ neurons (5×5)

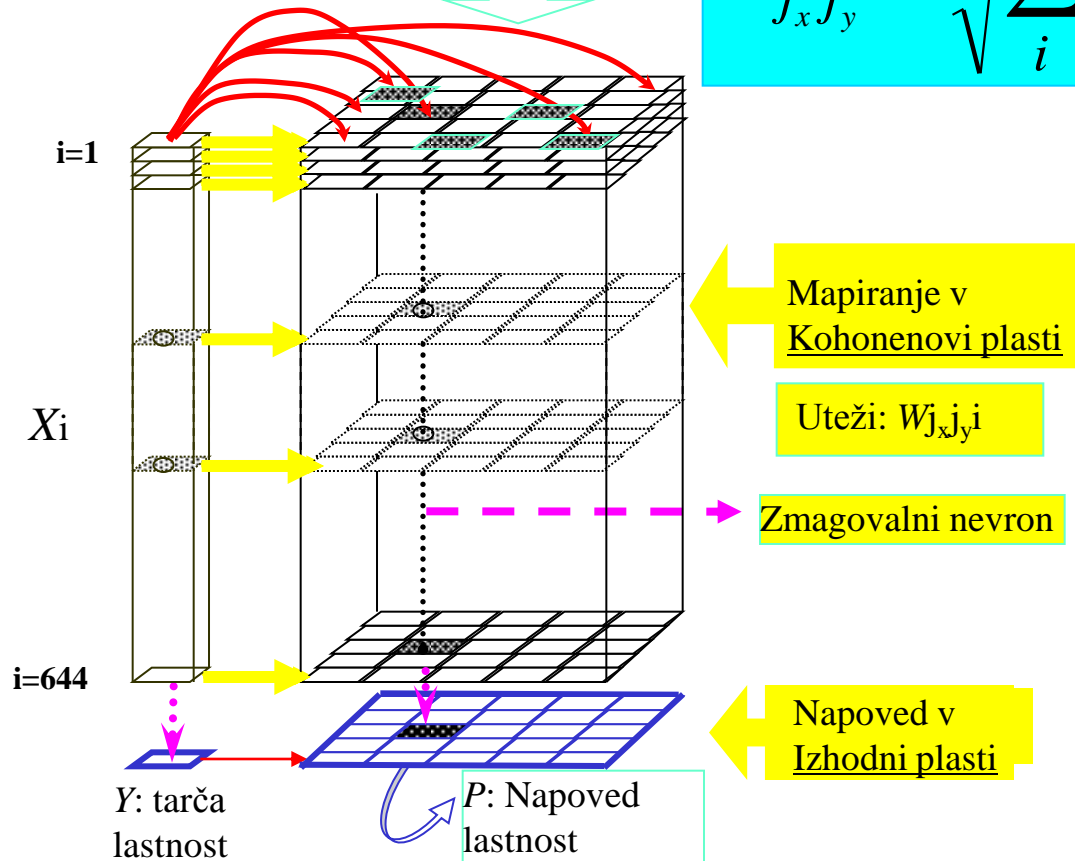


Protitočna (counterpropagation) mreža (CP-UNM)

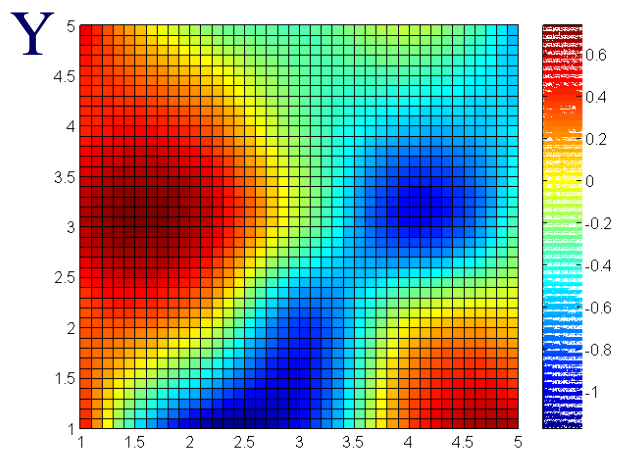
X : reprezentacija molekulske strukture

CPANN
 $j_x \times j_y$ neurons (5×5)

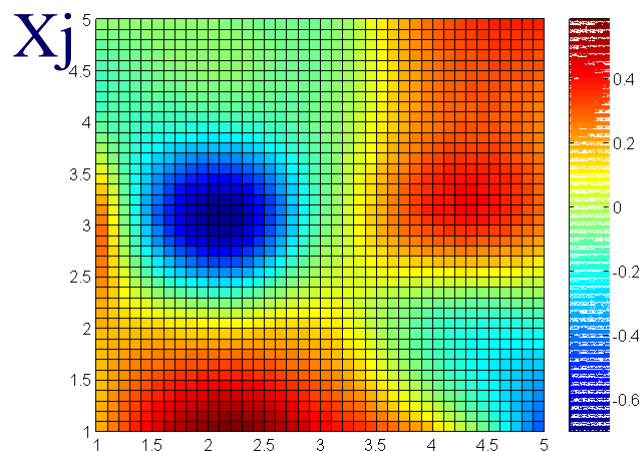
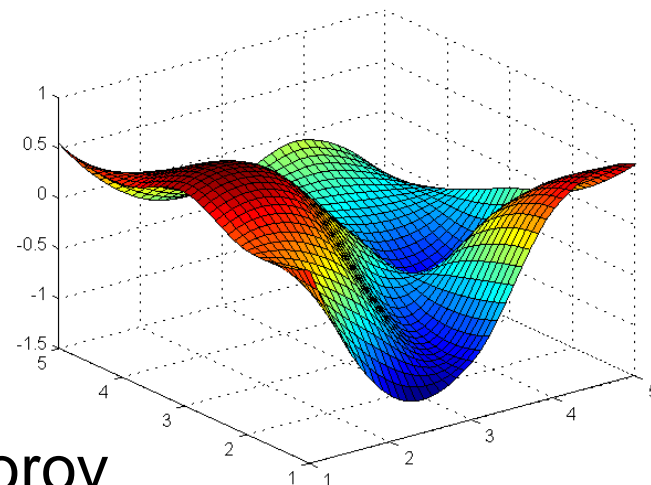
$$D_{j_x j_y} = \sqrt{\sum_i (x_i - w_{i, j_x j_y})^2}$$



Protitočna (counterpropagation) mreža (CP-UNM) za napoved vezavne afinitete za $ER\alpha$



Izhodna plast -
ravnina odgovorov



HOMO-LUMO energija