

Głębokie samoorganizujące się grafy neuronowe

Sieci neuronowe i drzewa decyzyjne, patrz rysunek 1, to dwa wyjątkowo efektywne modele obliczeniowe z dziedziny uczenia maszynowego z bogatą historią zastosowań, w szczególności w klasyfikacji i regresji. Zazwyczaj wynikające korzyści i ograniczenia z ich zastosowania wykluczają się:

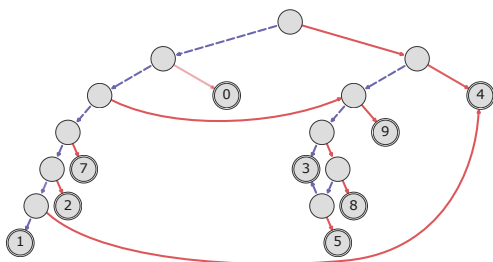
- W większości przypadków sieci neuronowe osiągają lepsze wyniki niż drzewa decyzyjne, ponieważ sieci równocześnie uczą się jak reprezentować i klasyfikować dane. Jednakże brakuje im przejrzystości działania i interpretowalności ich predykcji.
- Z drugiej strony, łatwo jest zrozumieć działanie drzew decyzyjnych, ponieważ zależą one od stosunkowo krótkiej sekwencji binarnych decyzji.

Dlatego też w ostatnich latach nałożono nacisk na połączenie pozytywnych aspektów obu modeli, to jest wysokiej skuteczności oraz interpretowalności predykcji.

Chociaż drzewa decyzyjne mogą zwiększać wydajność i interpretowalność sieci neuronowych, zwykle cierpią na wykładniczy wzrost z głębokością, powtarzającymi się węzłami i nieoptymalną strukturą, często ustalaną ręcznie przed treningiem. Stąd coraz więcej uwagi poświęca się łączeniu sieci neuronowych z grafami decyzyjnymi zamiast drzew. Grafy decyzyjne mają kilka zalet w porównaniu z drzewami decyzyjnymi. Wśród tych zalet jest elastyczna struktura, która umożliwia tworzenie wielu ścieżek od korzenia do każdego liścia. Dzięki niej węzły mogą być wielokrotnie wykorzystywane, co rozwiązuje problem replikacji, patrz rysunek 2. W konsekwencji wymagają one znacząco mniej pamięci, a jednocześnie istotnie poprawiają własności generalizacyjne modelu.

Niemniej jednak grafy decyzyjne nie są powszechnie używane w modelach korzystających z sieci neuronowych z następujących powodów:

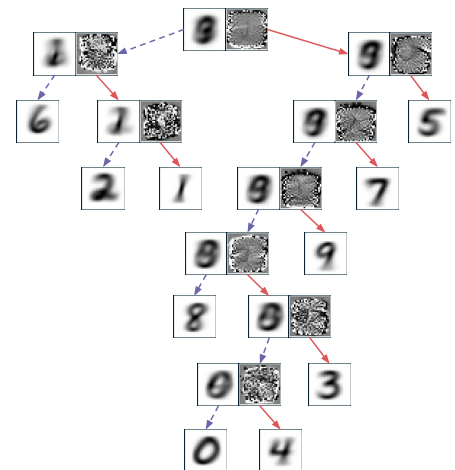
- Łączenie grafów z sieciami neuronowymi często wymaga predefiniowanej struktury. Predefiniowana struktura jest wadą w porównaniu z klasycznymi grafami decyzyjnymi, gdzie może być ona arbitralna.
- Nieoptymalny wybór funkcji kosztu w porównaniu z innymi modelami klasyfikacyjnymi, który jest obliczany za pomocą regresji logistycznej.
- W podejściach płytkich (takich jak drzewa decyzyjne) modele typu ensemble (korzystające z wielu podstawowych modeli równocześnie) są najbardziej dokładne, gdzie uśrednia się predykcje z wielu pojedynczych modeli trenowanych oddzielnie. Jednak uczenie ensemble przez sieć neuronową często prowadzi do bardzo wysokich kosztów obliczeniowych.



Rysunek 2:

Wizualizacja grafu decyzyjnego wytrenowanego na bazie danych MNIST. Warto zauważyć, że niektóre węzły są używane wielokrotnie.

nych.



Rysunek 1:

Wizualizacja płytkiego drzewa decyzyjnego wytrenowanego na bazie danych MNIST. Węzły są reprezentowane przez nauczone filtry i „średni” obraz przechodzący przez te węzły (odpowiadające odpowiednio prawej i lewej stronie każdego węzła).

Celem projektu jest rozwiązanie wyżej wymienionych problemów, wprowadzając model samoorganizującego się grafu neuronowego, który jest określonym typem grafu decyzyjnego trenowanego przez sieć neuronową. W szczególności planowane jest skonstruowanie elastycznej struktury grafu, która umożliwiłaby łatwą integrację ze standardową strukturą sieci neuronowej. W konsekwencji samoorganizujący się graf neuronowy powinien mieć możliwość przekształcania połączeń w sposób różniczkowalny, tak aby można było uzyskać końcowy graf, taki jak na rysunku 2.

Główną ideą jest wprowadzenie „połączeń probabilistycznych” między węzłami, gdzie po zastosowaniu decyzji binarnej w węzłach wewnętrznych, możliwe będzie przeskoczenie z uczonego prawdopodobieństwem do wszystkich węzłów wewnętrznych.