

Dobry den pan profesor.

Neviem ci vam Jirko spominal, ale tesne po novom roku som mu poslal uz jeden hotovy clanok ktory este nebol publikovany. Prikladam ho v prilohe.

Ma nazov:

Pouzitie optimalizovanej Echo State neurónovej siete pri predikcii energetických údajov EUNITE COMPETITION #1

Ide vlastne o kombináciu (spojenie) našich dvoch predchádzajúcich článkov (čiže tak ako optimalizácia vah v Dynamickom rezervoári [hebbian learning] tak isto aj optimalizácia vstupných vah do dynamickeho rezervoára [Metropolis algoritmu]). Ale veľký rozdiel oproti predchádzajúcim článkom je v údajoch a v zameraní článku. Kým tie predchádzajúce články boli zamerané len na porovnanie optimalizovanej siete s neoptimalizovanou, tak v tomto prípade som si vybral data z EUNITE COMPETITION #1, a porovnával som dosiahnuté výsledky aj s ostatnými prístupmi. Trošku ma prekvapilo ;), že som dosiahol s optimalizovanými Echo Statemi veľmi dobré výsledky a v celkovej súťaži by som sa s nimi zaradil na druhé miesto.

Jirko ten článok má, a presne som sa ho na to pytal, že či by bol vhodný do časopisu (good enough). A keď, tak do ktorého, zatiaľ mi ešte nedal vedieť. Budem rád, ak sa aj vy na neho pozriete.

Dakujem.
Stefan Babinec.

Použitie optimalizovanej *Echo State* neurónovej siete pri predikcii energetických údajov EUNITE COMPETION #1

Štefan Babinec¹, Jiří Pospíchal²

¹ Katedra matematiky, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie
Slovenská technická univerzita, Bratislava
E-mail: stefan.babinec@stuba.sk

² Fakulta informatiky a informačných technológií
Slovenská technická univerzita, Bratislava
E-mail: pospichal@fiit.stuba.sk

Abstrakt. V tejto práci sme overovali predikčné schopnosti optimalizovaných "*Echo State*" neurónových sietí pri predikcii energetických údajov – EUNITE COMPETION #1. Cieľom tejto práce bolo porovnanie výsledkov dosiahnutých s "*Echo State*" neurónovými sieťami s výsledkami dosiahnutými pomocou iných prístupov. Z pohľadu predikovaných údajov je veľmi dôležitý fakt, že pochádzajú zo skutočnej spoločnosti a viažu sa ku existujúcemu, presne špecifikovanému regiónu. Učenie "*Echo State*" neurónovej siete bolo navyše doplnené o úpravu váh dynamického rezervoára pomocou Hebbovho učenia a váhy spojov medzi vstupnými a skrytými neurónmi boli optimalizované pomocou Metropolisovho algoritmu. Výsledky dosiahnuté pomocou takto optimalizovanej "*Echo State*" neurónovej siete by sa v porovnaní s ostatnými metódami prihlásenými do tejto súťaže zaradili hneď za prvé víťazné miesto.

1. Úvod

Z hľadiska priechodu informácie sa neurónové siete dajú rozdeliť na dva typy sietí: dopredné neurónové siete a rekurentné neurónové siete. V dopredných neurónových sieťach vstupná informácia postupuje od vstupných neurónov k výstupným neurónom. Takéto siete v podstate implementujú vstupno-výstupné zobrazenie (funkcie) a môžu fungovať ako univerzálne aproximátory.

Oproti tomu u rekurentných neurónových sietí existuje aspoň jedna cyklická cesta, kedy tá istá vstupná informácia opakovane ovplyvňuje aktivitu neurónov na cyklickej ceste. Výhodou takýchto sietí môže byť ich bližšia príbuznosť k biologickým neurónovým sieťam, ktoré sú zväčša rekurentné. Z matematického hľadiska sú rekurentné neurónové siete tiež univerzálne aproximátory, ale implementujú dynamické systémy. Kvôli teoretickým aj praktickým ťažkostiam pri ich učení sú takéto siete menej využívané.

Typickými oblasťami využitia rekurentných neurónových sietí je klasifikácia vzorov, modelovanie asociatívnej pamäti, filtrovanie a predikcia, popr. modelovanie stochastických sekvencií.

Týchto schopností neurónových sietí sa využíva pri riadení (napr. v robotike), analýze reči, v telekomunikácii. Problémom všetkých takýchto sietí je chýbajúci efektívny algoritmus pre „učenie s učiteľom“.

Tento problém bol prekonaný v tzv. *Echo state* neurónových sieťach [3], popísaných ďalej. V týchto sieťach je použitý veľmi rýchly algoritmus učenia, ktorý spočíva vo výpočte jednej pseudoinverznej matice, čo je štandardný numerický postup.

Problémom tohto prístupu je, že nám ponúka takmer absolútne presné naučenie sa trérovacej množiny dát danou rekurentnou neurónovou sieťou, ale s predikčnou schopnosťou takto naučenej siete je to už horšie. Skutočne nepríjemné však je, že táto výhoda učenia sa „jedným krokom“ sa mení na nevýhodu, keď chceme predikčné schopnosti danej siete vylepšiť. Na to nám už prístup využívajúci pseudoinverznú maticu neponúka priamočiare riešenie.

Echo state neurónové siete obsahujú skrytú vrstvu zloženú z veľkého počtu neurónov. Túto vrstvu nazývame *dynamický rezervoár*. Echo State neurónové siete využívajú dynamiku tohto mohutného a náhodne inicializovaného dynamického rezervoára na extrahovanie zaujímavých vlastností zo vstupnej postupnosti.

Počet neurónov v dynamickom rezervoári je pri klasickom použití volený náhodne, a tak isto hodnoty synaptických váh v tejto mohutej skrytej vrstve sú v počiatkovej fáze generované náhodne. Možnosťou ako vylepšiť dynamiku neurónovej siete je práve adaptácia dynamického rezervoára. Vzhľadom na veľký počet neurónov v rekurentnej časti echo state neurónovej siete nie je možné aplikovať klasické prístupy trérovania priamočiario.

V tomto článku sme doplnili jednokrokové učenie sa pomocou pseudoinverznej matice jednak optimalizáciou už spomínaného dynamického rezervoára pomocou Hebbovho učenia a jednak optimalizáciou synaptických váh smerujúcich do dynamického rezervoára (skrytej vrstvy) pomocou Metropolisovho algoritmu. Výpočet pomocou pseudoinverznej matice nám určí váhy spojov zo skrytej vrstvy neurónov do výstupnej, zatiaľ čo Metropolisov optimalizačný algoritmus nám nastaví váhy zo vstupných a výstupných neurónov na skryté (tieto váhy boli pri klasickom použití pseudoinverznej matice určené náhodne).

Použitím takejto kombinácie optimalizačných algoritmov síce strácame výhodu rýchlosti „jednokrovej“ optimalizácie typických Echo state sietí, zato však získavame flexibilitu a lepšiu kvalitu predikcie.

Predikčné schopnosti optimalizovaných Echo state neurónových sietí boli overované na energetických údajoch pochádzajúcich zo súťaže, ktorá sa konala v roku 2001 pod záštitou EUNITE (European Network on Intelligent Technologies for Smart Adaptive Systems) – EUNITE COMPETITION #1.

2. Echo State neurónové siete

Echo state neurónové siete sú neobvyklým prístupom k analýze a trérovaniu rekurentných neurónových sietí (RNS). Tento prístup vedie k rýchlemu, jednoduchému a konštruktívnemu algoritmu, slúžiacemu ku kontrolovanému učeniu RNS. Základná idea echo state neurónových sietí je použitie veľkého „rezervoára“, ako zdroja dynamického správania sa neurónovej siete, z ktorého je kombinovaný požadovaný výstup.

Za určitých podmienok, stav $\bar{x}(n) = (x_1(n), x_2(n), \dots, x_N(n))$ RNS, kde $x_i(n)$ je výstup z i -tého vnútorného neurónu v čase n a N je počet vnútorných neurónov, je funkciou jej predchádzajúcich vstupov $\bar{u}(n), \bar{u}(n-1), \dots$, ktoré prešli sieťou.

$\bar{u}(n) = (u_1(n), u_2(n), \dots, u_K(n))$ je vstupný vektor, kde $u_i(n)$ je vstup do i -tého vstupného neurónu v čase n a K je počet vstupných neurónov. Čiže existuje taká funkcia E , že

$$\bar{x}(n) = E(\bar{u}(n), \bar{u}(n-1), \dots). \quad (1)$$

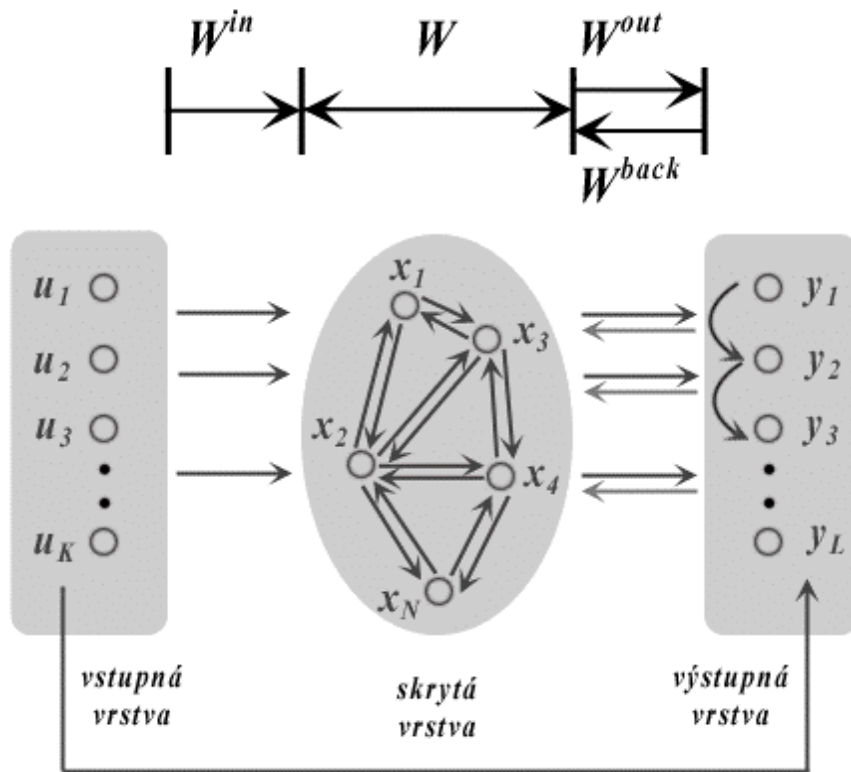
Metaforicky povedané, stav neurónovej siete $\bar{x}(n)$, môžeme považovať ako takzvané „echo“, ozvenu jej predchádzajúcich vstupov.

2.1 Popis neurónovej siete

Neurónová sieť sa skladá z K vstupných, N vnútorných a L výstupných neurónov.

Stav neurónov na vstupnej vrstve v čase n charakterizuje vektor $\bar{u}(n) = (u_1(n), u_2(n), \dots, u_K(n))$, na výstupnej vrstve vektor $\bar{y}(n) = (y_1(n), y_2(n), \dots, y_L(n))$ a stav vnútorných neurónov vektor $\bar{x}(n) = (x_1(n), x_2(n), \dots, x_N(n))$. Hodnoty všetkých synaptických váh ukladáme do matic.

Tým nám vznikne matica $\bar{W}^{in} = (w_{ij}^{in})$ vstupných váh s rozmerom $N \times K$, matica $\bar{W} = (w_{ij})$ vnútorných váh s rozmerom $N \times N$, matica $\bar{W}^{out} = (w_{ij}^{out})$ výstupných váh s rozmerom $L \times (K + N + L)$ a matica $\bar{W}^{back} = (w_{ij}^{back})$ spätných váh z výstupnej vrstvy do rezervoára s rozmerom $N \times L$. Tu si treba všimnúť, že v tomto type siete sú povolené váhy priamo zo vstupných neurónov na výstupné, ako aj váhy medzi výstupnými neurónmi.



Obrázok 1. Najčastejšie používaná architektúra Echo State neurónovej siete.

2.2 Algoritmus

Echo State neurónové siete umožňujú prispôbiť svoju štruktúru a topológiu charakteru úlohy. Nemusia byť nutne použité sigmoidálne výstupné neuróny (v ďalej prezentovaných výpočtoch neboli použité), môžu a nemusia existovať spätné váhy do dynamického rezervoára (ďalej boli použité), dokonca nemusí byť ani potreba použiť vstupné neuróny (v ďalšom boli použité).

Celý algoritmus tréningu a testovania Echo State neurónovej siete pozostáva zo štyroch krokov.

2.2.1 Prvý krok

Úlohou v prvom kroku je získať nenatrénovanú Echo State neurónovú sieť pozostávajúcu z $\bar{W}^{in}, \bar{W}, \bar{W}^{back}$, ktorá má ale takzvané „echo“ stavy. Existuje veľa spôsobov ako môžeme získať takúto sieť s danými vlastnosťami. Jedna z možností použitá aj v tejto práci je podrobne opísaná v [3].

2.2.2 Druhý krok

Druhý krok pozostáva z tréningu neurónovej siete a úlohou je získať matice \bar{M} a \bar{T} . Maticu \bar{M} tvoria jednotlivé stavy na všetkých neurónoch počas tréningového procesu, kde stav na jednotlivých neurónoch vypočítame na základe vzorca

$$\bar{x}(n+1) = f(\bar{W}^{in}\bar{u}(n+1) + \bar{W}\bar{x}(n) + \bar{W}^{back}\bar{y}(n)). \quad (2)$$

Maticu \bar{T} tvoria požadované výstupy prislúchajúce k jednotlivým stavom uloženým v matici \bar{M} a f je aktivačná funkcia vnútorných neurónov (pri vnútorných neurónoch sme použili sigmoidálnu funkciu a to hyperbolický tangens, na rozdiel od výstupného neurónu, kde bola použitá funkcia identity).

2.2.3 Tretí krok

Úlohou tretieho kroku je vypočítanie synaptických váh smerujúcich z dynamického rezervoára do výstupných neurónov, čiže ide o získanie matice \bar{W}^{out} . Na výpočet sa použijú matice \bar{M} a \bar{T} , ktoré sme získali v predchádzajúcom kroku. Vzorec má tvar

$$(\bar{W}^{out})^t = \bar{M}^{-1}\bar{T}, \quad (3)$$

kde \bar{M}^{-1} znamená pseudoinverznú maticu k matici \bar{M} . Výslednú maticu transponujeme a dostaneme požadovanú maticu \bar{W}^{out} .

2.2.4 Štvrtý krok

V tejto fáze máme už k dispozícii kompletnú sadu matíc synaptických váh $\bar{W}^{in}, \bar{W}, \bar{W}^{back}$ a \bar{W}^{out} , čo znamená, že neurónová sieť je pripravená na použitie. Na vstupné neuróny privádzame sekvencie nových vstupov $\bar{u}(n)$ a následne vypočítame im odpovedajúce výstupy na základe vzťahu

$$\bar{y}(n+1) = f^{out}(\bar{W}^{out}(\bar{u}(n+1), \bar{x}(n+1), \bar{y}(n))), \quad (4)$$

kde f^{out} je aktivačná funkcia na výstupných neurónoch.

3. EUNITE COMPETITION #1

V tomto príspevku sme overovali predikčné schopnosti optimalizovaných *Echo State* neurónových sietí pri predikcii energetických údajov – EUNITE COMPETITION #1. Hlavným cieľom tejto práce bolo dosiahnutie čo najlepších výsledkov predikcie a ich následné porovnanie s výsledkami dosiahnutými pomocou iných prístupov. Venovali sme sa aj porovnaniu kvality predikcie štandardných *Echo State* neurónových sietí s ich optimalizovanou verziou.

Základným charakterom týchto údajov je, že ide o merania rozsiahleho, otvoreného, dynamicky sa meniaceho systému, ktorý je navyše silne zašumený. Ide o silne nestacionárne údaje, ktorých charakter sa počas roka mení.

Úlohou bolo vypredikovať denné špičky záťaží elektrickej energie mesiaca Január, roku 1999 na základe určitých, presne špecifikovaných informácií z predchádzajúcich dvoch rokov. Informácie sa vzťahovali na región východného Slovenska a k dispozícii boli údaje uvedené v tabuľke č.1

Tabuľka 1. Dostupné údaje

Rok	Priemerné denné teploty	Záťaže elektrickej energie v polhodinových intervaloch	Zoznam sviatkov
1997	Ano	Ano	Ano
1998	Ano	Ano	Ano
1999	Nie	Nie	Ano

Jednotky záťaže elektrickej energie neboli špecifikované. Tu si treba všimnúť dve veci. K dispozícii boli záťaže elektrickej energie merané v polhodinových intervaloch, ale výstupom predikčného systému malo byť 31 hodnôt denných špičiek záťaží elektrickej energie. Druhý dôležitý fakt bol ten, že údaje o priemerných teplotách za rok 1999 neboli k dispozícii.

Na určovanie kvality predikcie slúžila priemerná absolútna percentuálna chyba MAPE¹

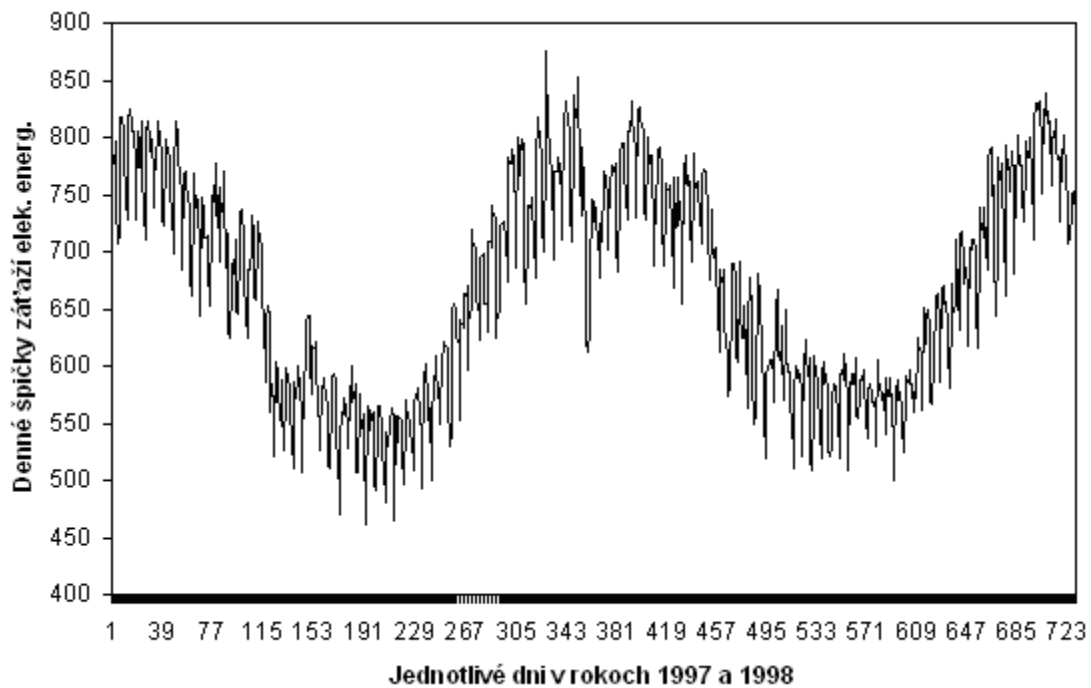
$$MAPE = \frac{\sum_{i=1}^N \frac{|P_i^{skut} - P_i^{vyp}|}{P_i^{skut}}}{N} \times 100 \quad (5)$$

a takisto maximálna chyba MAXIMAL

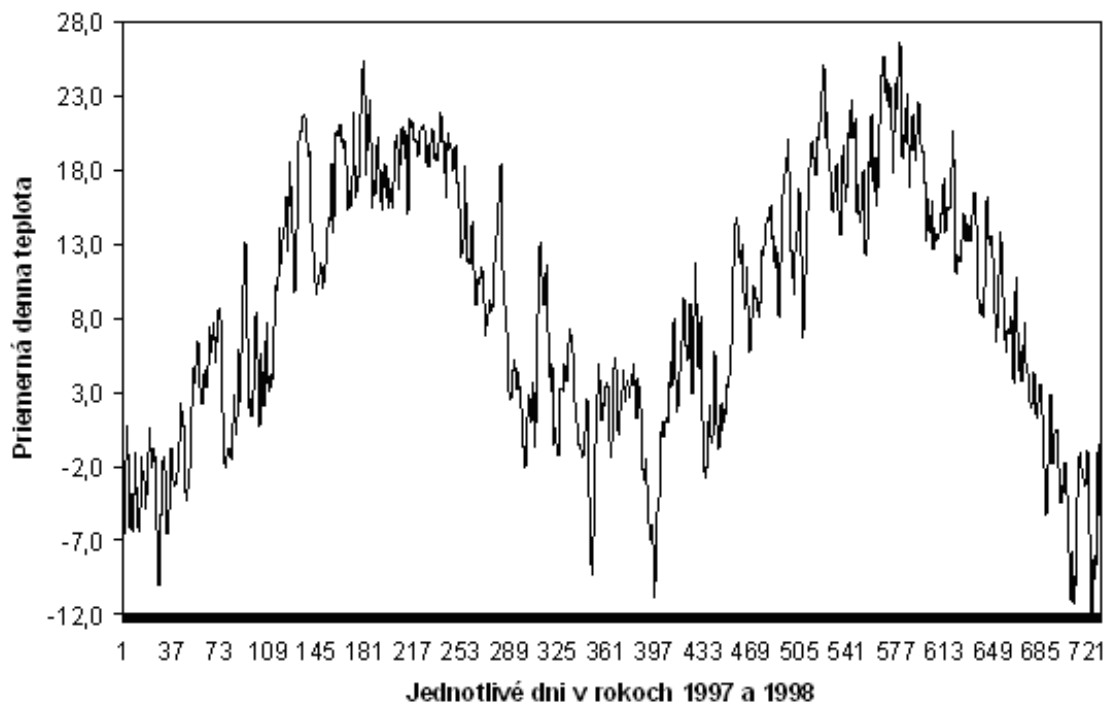
$$MAXIMAL = MAX(|P_i^{skut} - P_i^{vyp}|). \quad (6)$$

Minimálna hodnota záťaže elektrickej energie bola 317 jednotiek a maximálna hodnota 876 jednotiek. Dáta neobsahovali žiadne chýbajúce hodnoty. V mesiaci Január roku 1999 sa navyše vyskytovali dva sviatočné dni, čo malo za cieľ otestovať robustnosť predikčného systému.

¹ Mean absolute percentage error.



Obrázok 2. Na tomto obrázku vidíme denné špičky zátáží elektrickej energie v regióne východného Slovenska počas rokov 1997 a 1998.



Obrázok 3. Na tomto obrázku vidíme priemerné denné teploty v regióne východného Slovenska počas rokov 1997 a 1998

4. Optimalizácia Echo State neurónovej siete

V nasledujúcich častiach sa budeme venovať dvom oblastiam optimalizácie *Echo State* neurónových sietí. Prvou bude doplnenie klasického učiaceho algoritmu *Echo State* neurónových sietí pomocou Hebbovho učenia a druhá sa bude týkať optimalizácie synaptických váh smerujúcich do dynamického rezervoára (skrytej vrstvy) pomocou Metropolisovho algoritmu.

4.1 Optimalizácia synaptických váh pomocou Hebbovho učenia

Hebbovo učenie je najstaršie a zároveň najznámejšie učiace pravidlo. Tento prístup prvýkrát spomenul dr. Hebb vo svojej knihe *Organizácia správania* (The organization of behavior). Tieto myšlienky boli rozpracované do podoby dvoch nasledovných zásad:

- Ak dva neuróny na opačných stranách synapsie sú aktivované naraz (synchronne), potom hodnota synaptickej váhy sa zvýši.
- Ak dva neuróny na opačných stranách synapsie sa aktivujú v rôznych časoch (asynchronne), potom hodnota synaptickej váhy sa zníži.

Takéto synapsie neurónovej siete, ktoré spĺňajú spomenuté zásady nazývame *Hebbove synapsie*. Globálne môžeme Hebbove synapsie charakterizovať troma nasledovnými mechanizmami:

- mechanizmus závislý na čase - stav synaptickej váhy je závislý na stave pred a postsynaptických neurónov, ktoré sú závislé na čase,
- mechanizmus lokálnej definície - stav synapsie má priestorovo-časový charakter. Synapsie a synaptické váhy sú nositeľmi informácie a zdrojom ďalšej lokálnej zmeny. Preto neurónové siete s Hebbovými synapsiami sú schopné nekontrolovaného učenia,
- mechanizmus interakcie a korelácie - spôsob zmeny synaptickej váhy zaručuje interakciu medzi pred a postsynaptickými neurónmi. Tak isto je zaručený korelačný vzťah medzi spomínanými neurónmi, práve zaručením vlastností Hebbových synapsí.

Matematicky môžeme vyjadriť zmenu synaptickej váhy w_{kj} Hebbovej synapsie pre dvojicu neurónov k a j (kde j vstupuje do k) a časový krok n nasledovne:

$$\Delta w_{kj}(n) = F(y_k(n), x_j(n)), \quad (7)$$

kde $x_j(n)$ je aktivita predsynaptického neurónu a $y_k(n)$ je aktivita postsynaptického neurónu. F je funkcia postsynaptických a predsynaptických aktivít neurónov $y_k(n)$ a $x_j(n)$. Tieto aktivity sa niekedy označujú ako bezrozmerné veličiny. Špeciálnym prípadom rovnice (7) je nasledujúci zápis:

$$\Delta w_{kj}(n) = \eta y_k(n) x_j(n), \quad (8)$$

kde η je kladná konštanta, čiže takzvaný učiaci parameter. Rovnica (8) je najjednoduchšie pravidlo pre zmenu synaptickej váhy w_{kj} , vyjadrené ako súčin vstupného a výstupného signálu. Toto pravidlo jasne zdôrazňuje korelačný charakter

Hebbových synapsií. Niekedy sa označuje ako *aktivačné súčinnové pravidlo*. Zo vzorca (8) môžeme vidieť, že opakovaná aplikácia vstupného signálu (predsynaptickej aktivity) $x_j(n)$ vedie k exponenciálnemu nárastu, čo v konečnom dôsledku môže viesť k saturácii w_{kj} . Aby sme sa vyhli takejto situácii, potrebujeme si stanoviť hranicu na rast synaptickej váhy. Jednou z možností je zaviesť nelineárny zabúdaci faktor do vzorca (8) pre zmenu w_{kj} . Zmenu synaptickej váhy si predefinujeme takto:

$$\Delta w_{kj}(n) = \eta y_k(n) x_j(n) - \alpha y_k(n) w_{kj}(n), \quad (9)$$

kde α je nová kladná konštanta a $w_{kj}(n)$ je synaptická váha v čase n . Tento vzorec ale môžeme ďalej upraviť nasledovne:

$$\Delta w_{kj}(n) = \alpha y_k(n) [c x_j(n) - w_{kj}(n)], \quad (10)$$

kde c je η / α . Vzorec (10) sa niekedy označuje ako zovšeobecnené aktivačné súčinnové pravidlo. Zmysel tohto vzorca je v tom, že ak $x_j(n) < w_{kj}(n) / c$, tak modifikovaná synaptická váha $w_{kj}(n+1)$ v čase $n+1$ sa zníži proporcionálne k postsynaptickej aktivite $y_k(n)$. Na druhej strane, keď $x_j(n) > w_{kj}(n) / c$ tak synaptická váha $w_{kj}(n+1)$ sa zvýši proporcionálne k $y_k(n)$.

4.2 Optimalizácia synaptických váh pomocou Metropolisovho algoritmu

Väčšina stochastických optimalizačných algoritmov čerpá inšpiráciu v biologických procesoch. Metropolisov algoritmus sa používa na simuláciu fyzikálnej evolúcie systému, presnejšie na počítačovú simuláciu žihania tuhých telies. Postupnosť takýchto metropolisových algoritmov s postupným znižovaním teploty nazývame simulovaným žiňaním. V tomto článku ale simulované žiňanie na optimalizáciu nevyužívame, istým spôsobom ho nahradzuje ďalej opísaná dynamická mutácia. Metropolis a spol. navrhli metódu Monte Carlo [5], ktorá simuluje evolúciu systému tak, že generuje postupnosť stavov systému nasledujúcim spôsobom. Nech je daný aktuálny stav systému (určený polohou častíc telesa), potom sa malá náhodná porucha generuje tak, že častice sú „jemne“ posunuté. Táto porucha musí byť „symetrická“, t.j. pravdepodobnosť toho, že malou poruchou sa stav A zmení na stav B, musí byť rovnaká ako pri zmene malou poruchou stavu B na stav A. Ak je rozdiel $\Delta E = E_{\text{perturbed}} - E_{\text{current}}$ medzi porušeným stavom a aktuálnym stavom negatívny ($E_{\text{perturbed}} \leq E_{\text{current}}$), potom proces pokračuje s novým porušeným stavom. V opačnom prípade, ak $\Delta E \geq 0$, pravdepodobnosť $\text{Pr}(\text{perturbed} \leftarrow \text{current})$ akceptovania porušeného stavu určuje $\exp(-\Delta E / kT)$.

$$\text{Pr}(\text{perturbed} \leftarrow \text{current}) = \min(1, \exp(-\Delta E / kT)) \quad (11)$$

Toto pravidlo akceptovania porušeného stavu sa nazýva *Metropolisovo kritérium*. Podľa tohto kritéria aplikovaním veľkého počtu porúch a ich akceptovaním do ďalšieho procesu s pravdepodobnosťou Pr , dostaneme systém v tepelnej rovnováhe.

V tomto článku bola používaná konštantná hodnota formálneho parametru teploty $T=1$. Zavedieme nasledujúci formalizmus:

$$\vec{x} = (x_1, x_2, \dots, x_m) \quad (12)$$

je vektor vstupných váh do skrytej vrstvy neurónovej siete a každý prvok x_i predstavuje jednu vstupnú váhu. Funkcia $f(\vec{x})$ je v našom prípade vhodnosť daného vektora určená na základe chyby na testovacích údajoch. Čím menšia chyba, tým väčšia vhodnosť.

$$\vec{x}^{new} = (x_1^{new}, x_2^{new}, \dots, x_m^{new}) \quad (13)$$

je vektor v nasledujúcej iterácii, kde na každý jeho prvok bol aplikovaný operátor Michalewiczovej dynamickej mutácie [6]. Adekvátne $f(\vec{x}^{new})$ je vhodnosť novo vygenerovaného jedinca. Celý algoritmus funguje tak, že na začiatku sa náhodne inicializuje prvý vektor \vec{x}_{ini} a určí sa počet iterácií. Počet iterácií musí byť dostatočne veľký, aby mal algoritmus čas prehladať dostatočne veľký priestor riešení. Pomocou mutácie modifikujeme aktuálny stav \vec{x} na \vec{x}^{new} . Akceptovanie nového stavu sa rieši pomocou Metropolisovho kritéria:

$$Pr = \min(1, \exp(f(\vec{x}^{new}) - f(\vec{x}))) \quad (14)$$

Následne sa vygeneruje náhodne číslo z intervalu $[0,1]$ a ak je menšie ako Pr, tak je nový vektor prijatý do ďalšej iterácie, čiže $\vec{x} = \vec{x}^{new}$. To opakujeme pre všetky iterácie.

Michalewiczova dynamická mutácia

Ako mutačný operátor v Metropolisovom algoritme bola použitá Michalewiczova dynamická mutácia. Táto mutácia rozširuje vlastnosti náhodnej mutácie o schopnosť takzvaného jemného doladovania. Podstata je v tom, že dokáže v záverečných fázach optimalizácie mutovať jednotlivé elementy vektora tak, aby bol novo vygenerovaný prvok z menšieho okolia pôvodného prvku. Tým sa zabezpečí jemné doladenie hodnôt v danej oblasti. Nevýhodou tohto algoritmu je potreba nastavenia parametra udávajúceho počet iterácií behu optimalizačného algoritmu. Z toho vyplýva nutnosť neukončovať optimalizáciu pred uplynutím danej doby. Iba tak zabezpečíme vyhľadanie čo možno najvhodnejšieho riešenia vzhľadom na počítačové nastavenia a prítomný prvok pseudo-náhodnosti. V prípade potreby väčšieho počtu iterácií treba začať od začiatku a zmeniť príslušný parameter v algoritme Michalewiczovej mutácie. Ak má vektor tvar

$$\vec{x} = (x_1, x_2, \dots, x_m) \quad (15)$$

a ak x_i je vybraný prvok, ktorý sa má zmutovať, tak ho nahradíme pomocou nového

$$x_i^{new} = \begin{cases} x_i + \Delta(t, X_i^u - x_i) & \text{pre rand} \leq 0.5 \\ x_i - \Delta(t, x_i - X_i^l) & \text{pre rand} > 0.5 \end{cases} \quad (16)$$

kde rand je náhodné číslo s rovnomernou distribúciou z intervalu $[0,1]$, X_i^u je horné ohraničenie a X_i^l je dolné ohraničenie intervalu v ktorom sa má vygenerovať nové číslo. Vo všeobecnosti môžeme spraviť zápis pre oba výrazy v tvare $\Delta(t, y)$. Táto funkcia generuje číslo z intervalu $[0, y]$ a je definovaná ako

$$\Delta(t, y) = y(1 - r^{(1 - (t/T_{iter}))^B}), \quad (17)$$

kde r je náhodné číslo z intervalu $[0,1]$, T_{iter} je počet iterácií, B je nelineárny člen udávajúci spôsob zmenšovania okolia mutovaného bodu. Pre dané výpočty bola použité rôzne hodnoty v súlade s typicky používanými hodnotami v [2] a t udáva poradové číslo aktuálnej generácie.

5 Experimenty

Na obrázkoch 2 a 3 vidíme závislosť maximálnej dennej záťaže elektrickej energie a priemernej dennej teploty od dátumu, počas rokov 1997 a 1998. Medzi priemernou dennou teplotou a maximálnou záťažou je viditeľná jasná korelácia. Z dôvodu zvýšenia kvality predikcie energetických údajov vyplýva dôležitosť použitia teploty ako jedného zo vstupov do neurónovej siete.

Údaje o priemerných teplotách za január roku 1999 neboli k dispozícii. Keďže náš predikčný model energetických údajov je v podstatnej miere založený na znalosti tejto informácie, museli sme ich hodnoty určitým spôsobom získať. Najjednoduchším spôsobom ako získať tieto údaje bolo použitie Echo State neurónovej siete najprv k vypredikovaniu požadovaných teplotných údajov za január roku 1999 a až potom pristúpiť k predikcii denných špičiek záťaží elektrickej energie za ten istý mesiac toho istého roku. Tým pádom sa nám celá predikčná úloha rozdelila na dve separátne úlohy s rôznym charakterom.

Keďže potrebujeme vypredikovať 31 hodnôt, tak sa jedná o takzvanú viackrokovú predikciu. V oboch prípadoch, či už sa to týkalo predikcie teploty alebo predikcie energetických údajov boli otestované dva predikčné prístupy. Prvým bol prediktor, u ktorého je viackrokový predikčný mechanizmus priamo implementovaný do topológie neurónovej siete, čiže výstupná vrstva obsahovala presne 31 neurónov. Na výstupe týchto neurónov sa nachádzali už požadované hodnoty teploty, alebo denných špičiek záťaží elektrickej energie.

V druhom prístupe ide o využitie krátkodobého prediktora na viackrokovú predikciu, u ktorého tzv. iterovanou predikciu vieme dosiahnuť ľubovoľne veľký časový horizont predikcie. Výstupná vrstva obsahovala v tomto prípade iba jeden neurón a aktuálny výstup siete bol privádzaný ako vstup pre ďalší krok. Pri tomto type predikcie dochádzalo k opätovnému preučniu neurónovej siete, čo vzhľadom na rýchlosť učiaceho algoritmu nebol žiadny výpočtový problém. Lepšie výsledky sme dosiahli iterovanou predikciou, preto sa v ďalšom texte budeme zaoberať bližšie iba týmto prístupom.

V prípade predikcie teploty mala neurónová sieť jeden vstupný a jeden výstupný neurón. Jednalo sa vlastne o aproximáciu funkcie, keďže išlo o predikciu údajov na základe informácií o ich charaktere v minulosti. V prípade *Echo State* neurónovej siete nebola potreba vytvárať časové okno na vstupe, lebo pomocou dynamického rezervoára a učiaceho algoritmu je táto sieť schopná vnímať časové súvislosti medzi jednotlivými vzorkami.

Predikovali sme efektívnu teplotu, lebo práve tá tvorila jeden zo vstupov do neurónovej siete pri predikcii energetických údajov. Vypočítali sme ju na základe vzorca:

$$T(t) = 0,6T(t-1) + 0,4T(t), \quad (18)$$

kde $T(t)$ je teplota v čase t . Trénovaciú množinu tvorilo 730 vzoriek efektívnych teplôt v rokoch 1997, 1998 a testovaciú množinu tvoril prvý, januárový mesiac roku 1999 – čiže 31 vzoriek. Údaje boli transformované normalizáciou do intervalu $\langle 0,1 \rangle$.

V prípade predikcie energetických údajov mala neurónová sieť 5 vstupných neurónov a jeden výstupný neurón. Prvý vstup tvorila efektívna teplota, druhý vstup tvorila hodnota maximálnej dennej záťaže elektrickej energie a posledné 3 neuróny kódovali deň. Ten bol reprezentovaný bitovou trojicou hodnôt dní a to v slede

$$D(t-1) \rightarrow D(t) \rightarrow D(t+1), \quad (19)$$

kde $D(t)$ je označenie dňa vstupnej vzorky záťaže elektrickej energie. Môže nadobúdať diskkrétne hodnoty 0 alebo 1, a to podľa toho, či je daný deň sviatok, sobota, nedeľa (1), alebo iný deň (0). Trénovaciú množinu tvorilo 730 vzoriek z rokov 1997, 1998 a testovaciú množinu tvoril prvý, januárový mesiac roku 1999 – čiže 31 vzoriek. Údaje boli takisto transformované normalizáciou do intervalu $\langle 0,1 \rangle$.

Chyby MAPE a MAXIMAL slúžili aj ako hodnoty charakterizujúce dané riešenie či už v Metropolisovom algoritme, alebo pri optimalizácii synaptických váh pomocou Hebbovho učenia. Pomer podielu oboch chýb na celkovom hodnotení riešenia bol 1:1.

Samotný učiaci proces bol rozdelený do dvoch fáz, bez ohľadu na to, či išlo o predikciu teplotných alebo energetických údajov. Prvá časť mala za úlohu nájsť najvhodnejšie parametre Echo state neurónových sietí vzhľadom na kvalitu predikcie na trénovacích údajoch. V tejto prvej fáze ešte nebola použitá optimalizácia pomocou Hebbovho učenia ani pomocou Metropolisovho algoritmu. Výsledky pre teplotné údaje vidíme v tabuľke č. 2 a výsledky pre energetické údaje vidíme v tabuľke č. 3.

Tabuľka 2. Výsledky experimentov v prvej fáze pri predikcii teplotných údajov.

Index	Veľkosť DR	Alfa	Priemerná MAPE	Najlepšia MAPE	Priemerná MAXIMAL	Najlepšia MAXIMAL
1	200	0.7	38.953 %	33.514 %	8.3	6.7
2	200	0.8	42.481 %	34.287 %	8.8	7.1
3	250	0.7	31.557 %	27.451 %	7.5	5.6
4	250	0.8	35.863 %	29.328 %	7.9	6.2
5	300	0.7	44.128 %	35.286 %	9.5	7.3
6	300	0.8	46.329 %	37.477 %	10.2	7.7

Tabuľka 3. Výsledky experimentov v prvej fáze pri predikcii energetických údajov

Index	Veľkosť DR	Alfa	Priemerná MAPE	Najlepšia MAPE	Priemerná MAXIMAL	Najlepšia MAXIMAL
1	250	0.7	6.951 %	5.731 %	117.4	95.3
2	250	0.8	7.245 %	5.925 %	125.7	98.2
3	300	0.7	6.683 %	5.124 %	109.3	90.6
4	300	0.8	6.255 %	4.837 %	100.3	87.5
5	350	0.7	7.558 %	6.228 %	131.4	103.4
6	350	0.8	7.954 %	6.973 %	138.0	110.5

DR je dynamický rezervoár, Alfa je parameter ovplyvňujúci schopnosť neurónovej siete mať echo stavy (použité hodnoty boli zvolené v súlade s návrhom hodnôt používaných autorom „Echo state“ sietí Jaegerom, pozri [3]). Experimenty prebiehali nasledujúcim spôsobom. Pre každú hodnotu DR a parametra Alfa, ktoré sú uvedené v tabuľke č. 1 boli hodnoty synaptických váh v DR 1000 krát (toto číslo bolo zvolené odhadom, a je považované za dostatočne veľké pre štatistické vyhodnotenie predikčnej chyby na testovacej množine) vygenerované náhodne a pre každú inicializáciu váh bola vypočítaná chyba na testovacej množine. Následne bola vypočítaná priemerná chyba zo všetkých 1000 pokusov (atribút Priemerná MAPE a Priemerná MAXIMAL v tabuľkách č. 2 a č. 3) a takisto bola zaznamenaná najlepšia dosiahnutá chyba (atribút Najlepšia MAPE a Najlepšia MAXIMAL v tabuľkách č. 2 a č. 3).

Ako vidíme z tabuliek č. 2 a 3 medzi atribútmi *Priemerná* a *Najlepšia* existuje jasná korelácia. Čiže v tých prípadoch v ktorých bola dosiahnutá lepšia *Priemerná MAPE*, bola dosiahnutá aj lepšia *Najlepšia MAPE*. A v tých prípadoch, v ktorých bola dosiahnutá lepšia *Priemerná MAXIMAL*, bola dosiahnutá aj lepšia *Najlepšia MAXIMAL*. Najlepšie výsledky boli dosiahnuté v prípade predikcie teploty pre DR ktorý sa skladal z 250 neurónov a pre hodnotu parametra Alfa rovnú 0.7. V prípade predikcie denných špičiek záťaží elektrickej energie boli najlepšie výsledky dosiahnuté pre DR ktorý sa skladal z 300 neurónov a pre hodnotu parametra Alfa rovnú 0.8. V oboch prípadoch je vidno, že výrazné zväčšenie počtu vnútorných neurónov (DR) už nevedie k zníženiu chyby predikcie, dokonca došlo k zvýšeniu predikčnej chyby na testovacej množine.

Hlavné experimenty boli vykonávané v druhej fáze, už s čiastočnou znalosťou správania sa neurónovej siete. Parametre neurónovej siete a počiatková inicializácia synaptických váh dynamického rezervoára boli zvolené na základe najlepšie dosiahnutých výsledkov z prvej časti tohto experimentu. Následne došlo už k samotnej úprave synaptických váh dynamického rezervoára pomocou Hebbovho pravidla (10) pre všetky vzorky tréningovej množiny okrem posledných 7 vzoriek. Tento posledný týždeň roku 1998 bol vybraný ako validačná množina, na ktorej sa po úprave váh overovala kvalita predikcie na vzorkách, ktoré sieť nedostala k dispozícii počas učenia. Takýmto postupom prebehol veľký počet iterácií, pričom sa stále sledovala kvalita predikcie na validačnej množine.

Po optimalizácii dynamického rezervoára Hebbovým pravidlom nasledovala optimalizácia vstupných váh pomocou Metropolisovho algoritmu. Parametre neurónovej siete a hodnoty synaptických váh dynamického rezervoára boli zvolené na základe najlepšie dosiahnutých výsledkov pri optimalizácii pomocou Hebbovho pravidla. Veľkosť dynamického rezervoára mala priamo úmerný vplyv na veľkosť

optimalizovaného vektora, keďže zo vstupných a výstupných neurónov existovala práve jedna váha do každého neurónu v dynamickom rezervoári.

Bolo vykonaných množstvo experimentov, ktorých reprezentatívne výsledky môžeme vidieť v tabuľkách č. 4, 5, 6 a 7. Z nich jasne vyplýva, že počiatková inicializácia, či už to vstupných váh alebo samotného dynamického rezervoára, hrá rozhodujúcu úlohu pri predikčných schopnostiach Echo State neurónových sietí. A takisto, že optimalizáciou pomocou Hebbovho pravidla a Metropolisovho algoritmu dokážeme zlepšiť výsledky vo výraznej miere. To je vidno aj z obr. č. 4 a č. 5.

Tabuľka 4. Výsledky reprezentatívnych experimentov v druhej fáze po optimalizácii pomocou Hebbovho pravidla pre teplotné údaje.

Index	Počet iterácií	Parameter η	Parameter α	MAPE1 / MAXIMAL1	MAPE2 / MAXIMAL2
1	2000	0.01	0.001	27.451 % / 5.6	21.547 % / 3.9
2	3770	0.001	0.0001		18.791 % / 3.2
3	4820	0.0001	0.00001		23.287 % / 4.4

Tabuľka 5. Výsledky reprezentatívnych experimentov v druhej fáze po optimalizácii pomocou Hebbovho pravidla pre energetické údaje.

Index	Počet iterácií	Parameter η	Parameter α	MAPE1 / MAXIMAL1	MAPE2 / MAXIMAL2
1	1900	0.01	0.001	4.837 % / 87.5	4.023 % / 71.2
2	4150	0.001	0.0001		3.521 % / 66.7
3	5100	0.0001	0.00001		4.218 % / 78.3

Atribút *Počet iterácií* udáva po koľkých iteráciách bola dosiahnutá najlepšia chyba na validačnej množine. Atribúty *Parameter η* a *Parameter α* nám udávajú hodnoty parametrov z rovnice (9), pri ktorých boli dosiahnuté najlepšie výsledky na validačnej množine po optimalizácii neurónovej siete pomocou Hebbovho pravidla. Atribúty *MAPE1 / MAXIMAL1* nám udávajú chybu neurónovej siete na testovacej množine ešte pred optimalizáciou. Táto hodnota bola pre všetky pokusy rovnaká, pretože každá optimalizácia vychádzala z neurónovej siete s rovnakými počiatkovými inicializáciami váh a rovnakými parametrami neurónovej siete. Parametre *MAPE2 / MAXIMAL2* nám udávajú hodnoty chýb na testovacej množine po optimalizácii pomocou Hebbovho pravidla.

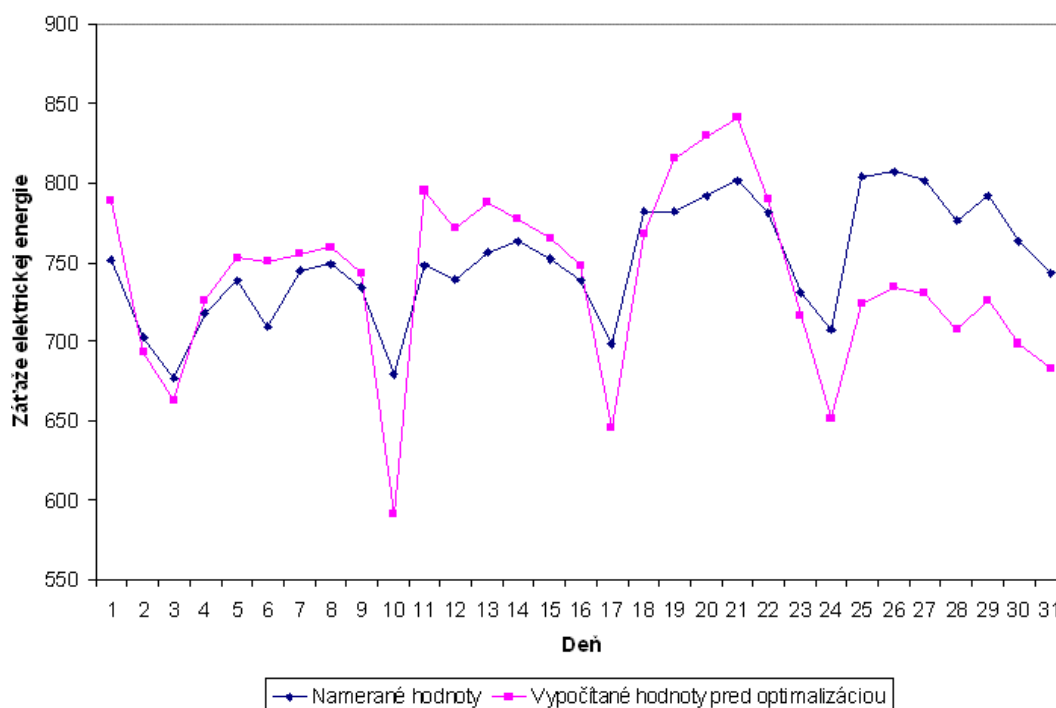
Tabuľka 6. Výsledky reprezentatívnych experimentov v druhej fáze po optimalizácii pomocou Metropolisovho algoritmu pre teplotné údaje.

Index	Parameter T_{iter}	Parameter B	MAPE2 / MAXIMAL2	MAPE3 / MAXIMAL3
1	2000	0.6	18.791 % / 3.2	14.637 % / 2.3
2	2500	0.7		12.285 % / 1.9
3	3000	0.8		15.112 % / 2.6

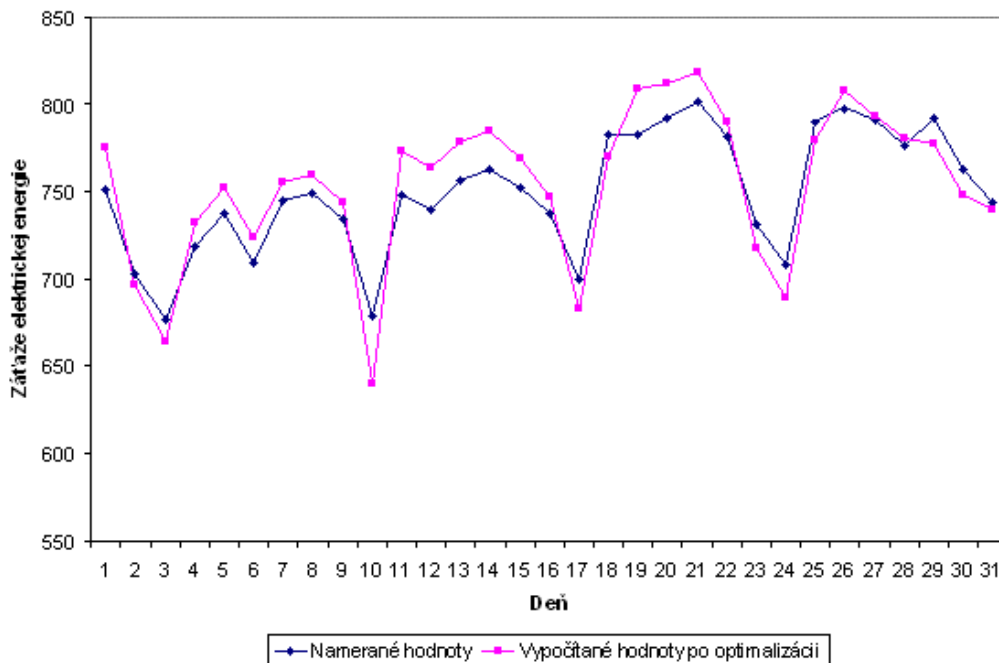
Tabuľka 7. Výsledky reprezentatívnych experimentov v druhej fáze po optimalizácii pomocou Metropolisovho algoritmu pre energetické údaje.

Index	Parametre T_{iter}	Parameter B	MAPE2 / MAXIMAL2	MAPE3 / MAXIMAL3
1	3500	0.7	3.521 % / 66.7	2.538 % / 48.6
2	4000	0.9		2.021 % / 39.2
3	4500	0.8		2.986 % / 56.3

Atribúty *Parameter T_{iter}* a *Parameter B* nám udávajú hodnoty parametrov z rovnice (17), pri ktorých boli dosiahnuté najlepšie výsledky na validačnej množine po optimalizácii neurónovej siete pomocou Metropolisovho algoritmu. Atribút *MAPE2* nám udáva chybu neurónovej siete na testovacej množine po optimalizácii pomocou Hebbovho pravidla, ale ešte pred optimalizáciou pomocou Metropolisovho algoritmu. Táto hodnota bola pre všetky pokusy rovnaká, pretože každá optimalizácia pomocou Metropolisovho algoritmu vychádzala z neurónovej siete s rovnakými počiatočnými inicializáciami váh a rovnakými parametrami neurónovej siete. Parameter *MAPE3* nám udáva hodnotu chyby na testovacej množine už po optimalizácii pomocou Metropolisovho algoritmu.



Obrázok 4. 31 hodnôt špičiek zátáží elektrickej energie a 31 nami predikovaných hodnôt, pričom vstupné váhy do dynamického rezervoára a váhy samotného dynamického rezervoára boli inicializované náhodne. MAPE 4.837 %, MAXIMAL 87.5, pokus s indexom 4 z tabuľky č. 3.



Obrázok 5. 31 hodnôt špičiek záťaží elektrickej energie a 31 nami predikovaných hodnôt, pričom vstupné váhy do dynamického rezervoára a váhy samotného dynamického rezervoára boli optimalizované pomocou Hebbovho pravidla a Metropolisovho algoritmu. MAPE 2.021 %, MAXIMAL 39.2, pokus s indexom 2 z tabuľky č. 7.

V tabuľke č. 8 môžeme vidieť najlepšie dosiahnuté výsledky, získané pomocou optimalizovaných Echo State neurónových sietí. Takisto pre porovnanie môžeme vidieť dosiahnuté výsledky iných autorov, ktorí sa zúčastnili EUNITE COMPETITION #1. Pri vyhodnocovaní súťaže mala väčší vplyv na výsledné poradie chyba MAPE. Ako vidíme, výsledky získané pomocou optimalizovaných Echo State neurónových sietí by sa zaradili na vynikajúce 2 miesto. Dosiahnutá chyba MAXIMAL bola v našom prípade dokonca najnižšia z celého poľa účastníkov tejto súťaže.

Tabuľka 8. Najlepší výsledok dosiahnutý pomocou optimalizovaných Echo State neurónových sietí pri predikcii energetických údajov -- EUNITE COMPETITION # 1. Takisto môžeme vidieť dosiahnuté výsledky iných autorov.

	Autor	MAPE	MAXIMAL
	Babinec, Pospíchal	2.021 %	39.2 MW
Miesto	Autor	MAPE	MAXIMAL
1	Chih-Jen Lin	1.9824 %	51.42 MW
2	David Esp	2.1486 %	40.00 MW
3	Werner Brockmann	2.4979 %	60.50 MW
4	Dalibor Živčák	2.8733 %	65.84 MW

6 Záver

Echo state neurónové siete patria k relatívne novým prístupom v oblasti neurónových sietí. Ich výhodou je väčšia príbuznosť biologickým modelom vlastná rekurentným sieťam a využitie rezervoáru dynamického správania bez nastavovania váh. Z hľadiska využitia sú vynikajúce na naučenie sa časovej rady, čo je nevyhnutný predpoklad napríklad pre riadenie motoriky, nech už u človeka, alebo u robota, alebo napr. na spracovanie reči. Oproti ostatným typom rekurentných sietí majú echo state siete podstatnú výhodu v schopnosti učiť sa "jednokrokovu", aj keď tento prístup nemusí byť veľmi biologicky plauzibilný. Za nevýhodu sa dá ale považovať relatívne menšia schopnosť generalizácie a predovšetkým absencia prístupu, ktorý by bol schopný aspoň čiastočne vylepšiť už naučenú sieť.

Problém vylepšenia naučenej siete sa nevyskytuje u bežných dopredných alebo aj rekurentných neurónových sietí, pretože v prípade potreby vylepšenia siete sa už naučená sieť dá "doučiť" jednoducho ďalšími iteráciami klasického prístupu k učeniu pomocou spätného šírenia chyby. To ale nefunguje u sietí s echo stavmi, kedy štandardný algoritmus dovoľuje "všetko alebo nič", teda sieť alebo naučíme, alebo nenaučíme, ale nič medzi tým. Už naučená sieť sa nedá týmto prístupom čiastočne "doučiť".

Vyššie uvedený problém sme sa pokúsili riešiť v našej práci, kde sme využili dva prístupy na vylepšenie učenia echo siete. Obidva prístupy vychádzajú z biologicky plauzibilných metód. Prvým prístupom je známe Hebbovo učenie, zosilňujúce väzby medzi súčasne zapálenými neurónmi, druhou je Metropolisov algoritmus využitý na optimalizáciu vstupných váh do dynamického rezervoára.

Keďže sme nechceli pracovať s umelo vytvorenými príkladmi, zvolili sme si na ohodnotenie kvality našich nových prístupov učenia reálne dáta, a to energetické údaje záťaže elektrickej energie na Slovensku – EUNITE COMPETITION #1. Cieľom bolo overiť vplyv optimalizácie na kvalitu predikcie echo state sietí a porovnať dosiahnuté výsledky s inými účastníkmi tejto súťaže. Z výsledkov uvedených v článku je zrejmé, že tento cieľ sa nám podaril. Hebbovo učenie a aj použitie Metropolisovho algoritmu v neurónových sieťach s echo stavmi sú schopné podstatne zvýšiť kvalitu predikcie siete a tým spraviť tieto siete konkurencieschopné v predikčných úlohach.

PodĎakovanie. Tento príspevok vznikol za podpory grantovej agentúry VEGA SR v rámci grantových úloh 1/1047/04 a 1/0062/03, a za podpory grantovej agentúry APVT v rámci grantovej úlohy APVT-20-002504.

Literatúra

- [1] Kvasnička, V., Pospíchal, J., Tiňo, P.: *Evolučné Algoritmy*. Vydavateľstvo STU: Bratislava 2000.
- [2] Summanwar, V.S., Jayaraman, V.K., Kulkarni, B.D., Kusumakar, H.S., Gupta, K., Rajesh, J.: Solution of Constrained Optimization Problems by Multi-Objective Genetic Algorithm. *Computers and Chemical Engineering* 26 (2002) 1481-1492.
- [3] Jaeger, H.: *The "Echo State" Approach to Analysing and Training Recurrent Neural Networks*. German National Research Center for Information Technology, GMD report 148, 2001.
- [4] Jaeger, H.: *Short Term Memory in Echo State Networks*. GMD report 152, 2002.
- [5] Haykin S.: *Neural networks – A comprehensive foundation*. Macmillian Publishing, 1994.
- [6] Metropolis, N., Rosenbluth, A.W., Rosenbluth, M.N., Teller A.H. and Teller E.: Equation of State Calculations by Fast Computing Machines. *J. Chem. Phys.* 21 (1953) 1087-1092.
- [7] Janikow, C., Michalewicz Z.: An experimental comparison of binary and floating point representations in genetic algorithms. In *Proceedings of the Fourth International Conference on Genetic Algorithms*, pp. 31-36. Morgan Kaufmann, 1991.
- [8] Wan, E.: *Finite Impulse Response Neural Networks with Applications in Time Series Prediction*, PhD thesis, Department of Electrical Engineering. Stanford University, November 1993.
- [9] Saito, K., Nakano, R.: *Numeric Law Discovery using Neural Networks*. Proc. of the 4th International Conference on Neural Information Processing (ICONIP97), pp. 843-846, Dunedin 1997.
- [10] Sinčák, P., Strackeljan, J., Kolcun, M., Novotný, D., Szathmáry, P.: *Electricity Load Forecast Using Intelligent Technologies*. 231 strán, ISBN 80-89066-41-0, September 2002.