Kapitola 8

ICA a ICA siete

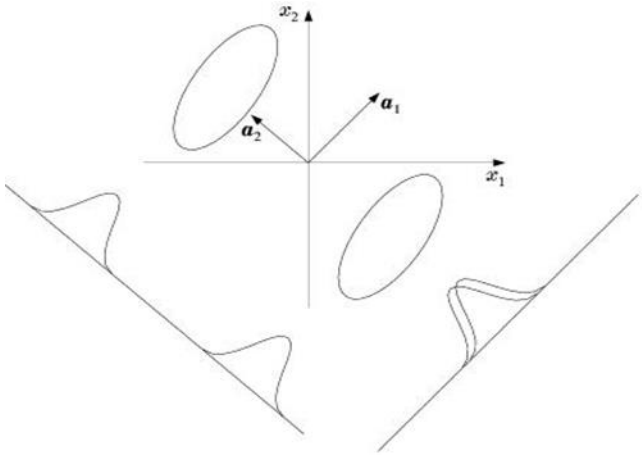
TÉMY

- *ICA – analýza nezávislých komponentov*
- *model dát pre ICA a separáciu zdrojov*
- *separácia zdrojov*
- *neurónové siete pre ICA*

ICA – analýza nezávislých komponentov (“Independent Component Analysis”)

- PCA
  - výsledkom sú vzájomne nekorelované príznaky
  - ak cieľom je redukcia dimenzie a minimalizácia MSE, ide o optimálne riešenie

- ICA
  - viac ako dekorelácia dát
  - výsledkom sú vzájomne nezávislé príznaky
  - štatistická nezávislosť je silnejšia podmienka ako nekorelovanosť pri PCA
  - tieto dve podmienky sú rovnaké iba pre gaussovské náhodné premenné
  - využívajú sa štatistiky vyššieho rádu



- projekcia na $\mathbf{a}_1$: KLT-štatistika druhého rádu
- chceme projekciu na $\mathbf{a}_2$ – z hľadiska separovateľnosti tried

ICA – analýza nezávislých komponentov (Independent Component Analysis)

- cieľom je nájsť štatisticky nezávislé príznaky
- má zmysel iba pre negaussovské dáta

- neexistuje zoradenie koeficientov
  - PCA – zoradenie podľa vl. čísel
  - ICA – je to možné iba napr. podľa „negaussovitosti“ – kumulant 4. rádu

- silnejšia požiadavka, využitie štatistík vyšších rádov (viac ako druhého)
  - kumulanty rádu:
    1. stredná hodnota
    2. variancia
    3. šikmosť (miera pre súmernosť)
    4. exces (miera pre strmosť); kurtosis

$$\kappa_1(x) = E[x] = 0$$

$$\kappa_2(x) = E[x^2] = \sigma^2$$

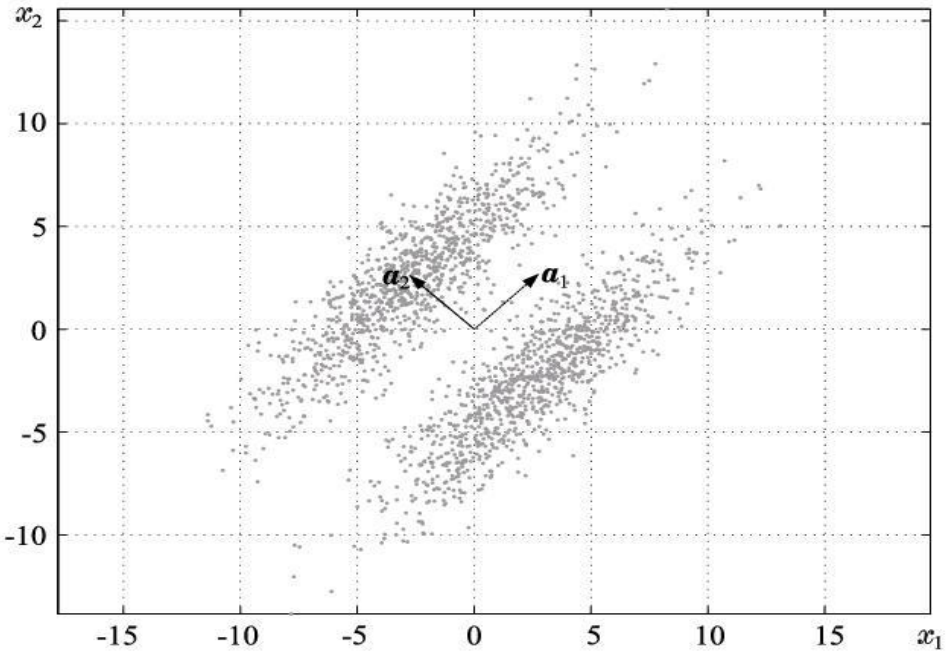
$$\kappa_3(x) = E[x^3]$$

$$\kappa_4(x) = E[x^4] - 3\sigma^4$$

ICA – analýza nezávislých komponentov (Independent Component Analysis)

- PCA – projekcia na $\mathbf{a}_1$
  - výsledkom je náhodná premenná s rozdelením blízkym Gaussovmu; gaussovská štatistika

- ICA – projekcia na $\mathbf{a}_2$
  - výsledkom je náhodná premenná s negaussovským rozdelením; bimodálna štatistika (negaussovská)

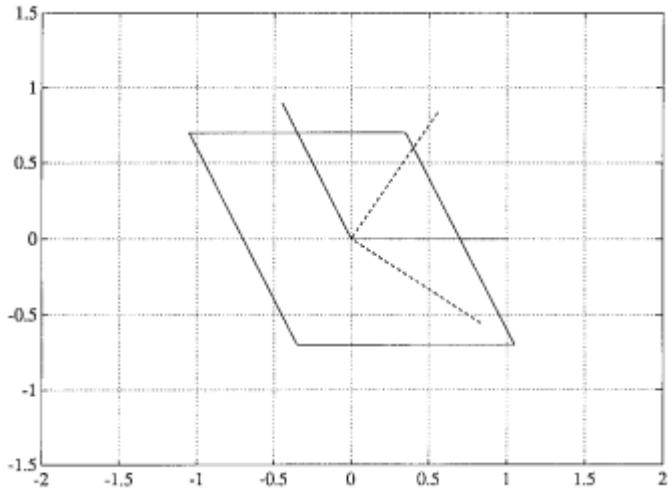


Theodoridis S., Koutroumbas K.: Pattern Recognition, 3rd.ed., Academic Press, San Diego, CA, USA, 2006

ICA – analýza nezávislých komponentov (Independent Component Analysis)

- Rovnomerné rozdelenie dát vnútri kosodĺžnika:
  - PCA - čiarkované osi
  - ICA – plné osi

- PCA – ortogonálna báza
- ICA – neortogonálna báza



Karhunen,J.,Oja,E.,Wang,L.,Vigário,R.,Joutsensalo,J.: A Class of Neural Networks for Independent Component Analysis, IEEE Trans. on Neural Networks, Vol.8, No.3, May 1997, str. 486-503

Analýza nezávislých komponentov ICA

- rozšírenie štandardnej analýzy hlavných komponentov PCA

- využíva sa hlavne pre *separáciu* zdrojových signálov z ich lineárnych kombinácií
  - hľadanie zdrojových signálov
    - korešpondujú s koeficientami ICA

- kompletná ICA:
  - vyhladzovanie
  - separácia zdrojov
  - odhad bázových vektorov ICA

Analýza nezávislých komponentov ICA

- dajú sa využiť viacvrstvové dopredné neurónové siete (NS)

- NS pre kompletnú ICA:
  - vyhladzovacia (“whitening”) vrstva
  - vrstva pre separáciu
  - vrstva pre odhad bázových vektorov ICA

Model dát pre ICA a separáciu zdrojov

- M zdrojových signálov $s_1(n),\ldots,s_M(n),\quad n=1,2,\ldots,$
  - majú nulovú strednú hodnotu
  - sú vzájomne štatisticky nezávislé pre každé n
  - majú skalárne hodnoty

- **Nezávislosť**
  - vzájomná hustota pravdepodobnosti zdrojových signálov je súčinom hustôt pravdepodobnosti jednotlivých zdrojov

$$p[s_1(n),s_2(n),\ldots,s_M(n)]=\prod_{i=1}^{M}p_i[s_i(n)]$$

- máme zašumené lineárne kombinácie $x_1(n),\ldots,x_L(n)$
- $v_j(n)$ je šum

$$x_j(n)=\sum_{i=1}^{M}s_i(n)a_{ij}+v_j(n)$$

- koeficienty a_{ij} sú neznáme

- predpoklad - všetky lineárne kombinácie sú rôzne
- $\mathbf{x}(n) = [x_1(n), \ldots, x_L(n)]^T$: L-rozmerný vektor vytvorený z lineárnych kombinácií
- **model pre ICA**

$$\mathbf{x}(n) = \mathbf{A}\mathbf{s}(n) + \mathbf{v}(n) = \sum_{i=1}^{M} s_i(n)\mathbf{a}_i + \mathbf{v}(n)$$

  - $\mathbf{s}(n) = [s_1(n), \ldots, s_M(n)]^T$ je vektor zdrojov pozostávajúci z M zdrojových signálov (*nezávislých komponentov*) $s_i(n), i = 1, \ldots, M$ v čase (bode) n
  - matica $\mathbf{A} = [\mathbf{a}_1, \ldots, \mathbf{a}_M]$ je konštantná "*zmiešavacia matica*" typu $L \times M$
    - stĺpce $\mathbf{a}_i$ sú *bázové vektory ICA*
    - $\mathbf{v}(n)$ -prípadne prítomný aditívny šum
  - ***Separácia zdrojov***
    - úlohou je nájsť zdroje $\{s_i(n)\}$
      - poznáme iba vektory $\mathbf{x}(n)$ a počet zdrojov M
      - v prípade *kompletnej ICA* je úlohou nájsť tiež bázové vektory $\mathbf{a}_i, i = 1, \ldots, M$ pre ICA

Predpoklady

- počet zdrojov *M* neprevyšuje *L* (dimenzia vektorov $\mathbf{x}(n)$)
  - *M* je vopred známe
- zdrojové signály štatisticky nezávislé
- každý zdrojový signál je stacionárny stochastický proces s nulovou strednou hodnotou
- iba jeden zo zdrojových signálov $s_i(n)$ môže mať gaussovské rozdelenie pravdepodobnosti
  - je nemožné vzájomne separovať niekoľko gaussovských zdrojov

Separácia zdrojov

- chceme získať nezávislé zdrojové signály $\{s_i(n)\}, n = 1, \ldots$

- Pri adaptívnej separácii zdrojov sa upravuje *separačná matica* $\mathbf{B}(n)$ typu $M \times L$ tak, že M -rozmerný vektor

$$\mathbf{y}(n) = \mathbf{B}(n)\mathbf{x}(n)$$

sa stane odhadom $\mathbf{y}(n) = \hat{\mathbf{s}}(n)$ originálnych nezávislých zdrojových signálov

- vektory $\mathbf{x}(n)$ sa predspracujú vyhladzovaním
  - ich korelačné matice sa stanú jednotkovými maticami
  - po vyhladení bude separačná matica ortogonálna

Neurónové siete pre ICA

- **Odhad ICA**

$$\mathbf{x}(n) = \mathbf{Q}\mathbf{y}(n) + \mathbf{v}'(n)$$

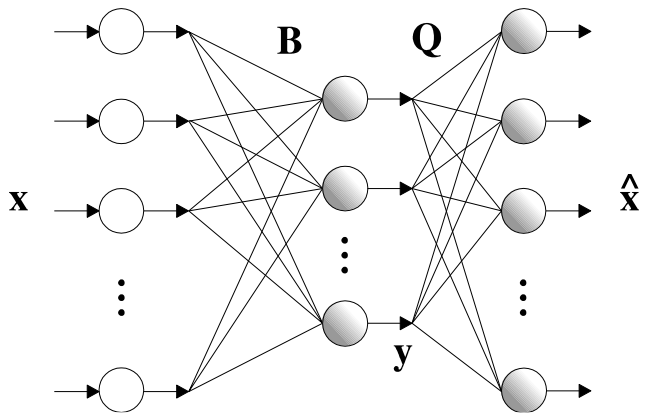
  - matica $\mathbf{Q}$ typu $L \times M$ - odhad matice $\mathbf{A}$ bázy ICA
  - $\mathbf{y}(n)$ - odhad zdroja (nezávislého komponentu) $\mathbf{s}(n)$
  - $\mathbf{v}'(n)$ - šum alebo chybový člen

- **odhad ICA - neurónová sieť**:

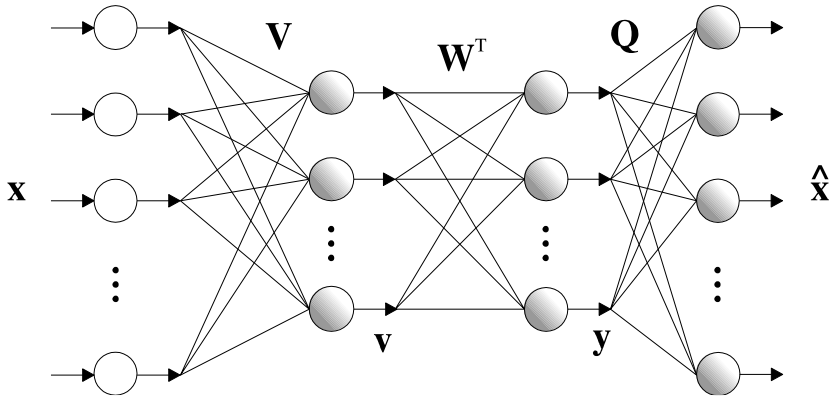
  - dopredná sieť konfigurácie $L - M - L$

    1) učenie váhovej matice $\mathbf{R} = \mathbf{B}$, pre ktorú sú komponenty $\mathbf{y} = \mathbf{R}\mathbf{x}$ nezávislé
    2) učenie váhovej matice $\mathbf{Q}$, ktorá minimalizuje chybu $E\left[\left\|\mathbf{x} - \mathbf{Q}\mathbf{y}\right\|^2\right]$

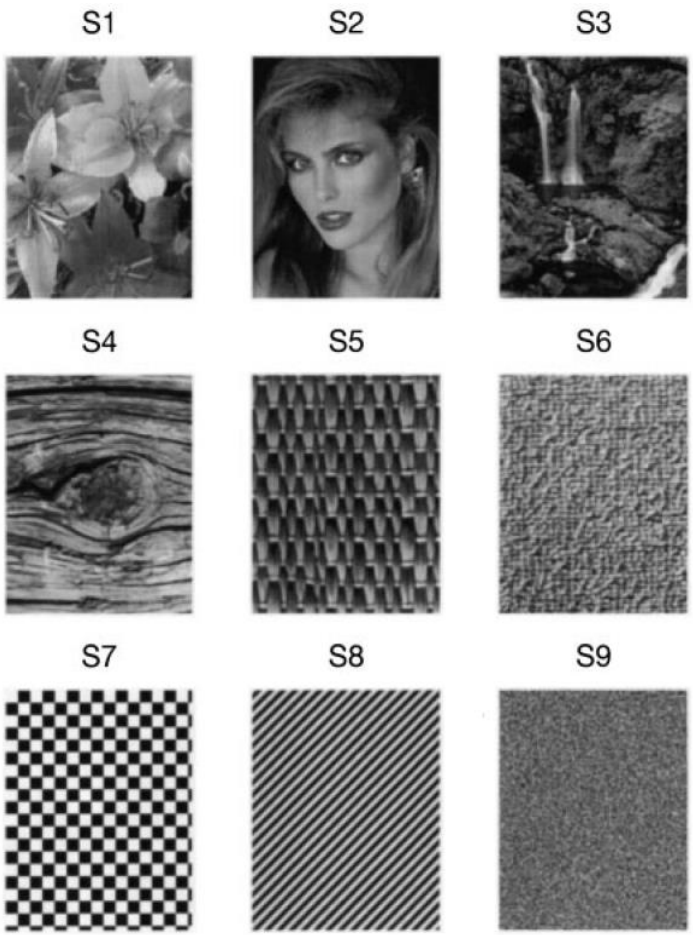
Dopredná sieť pre výpočet ICA (bez vyhladzovania):



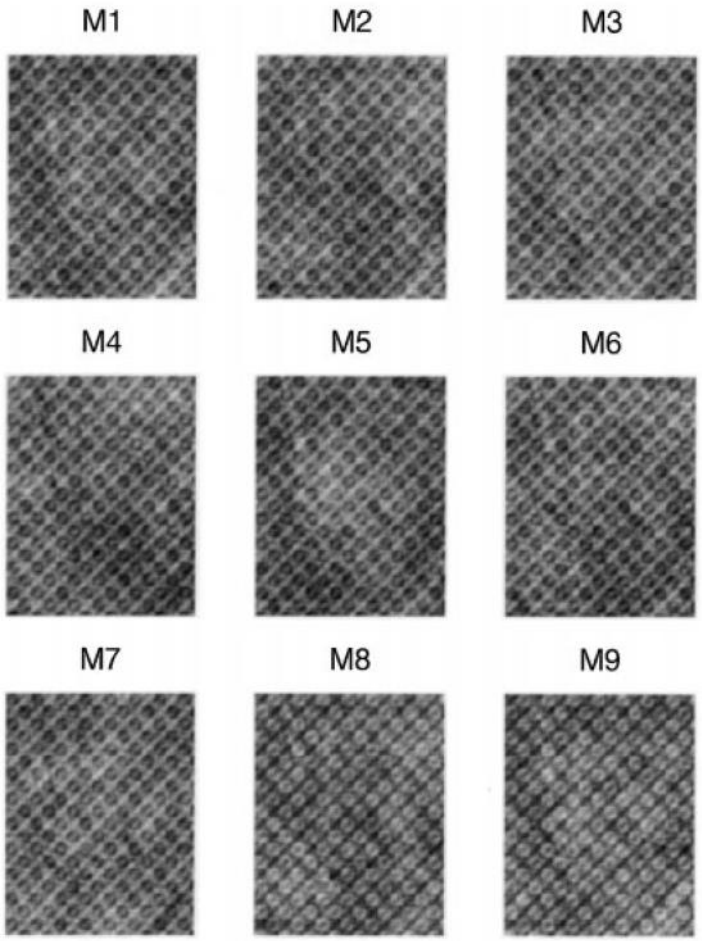
Dopredná sieť pre úplnú ICA (vyhladzovanie, separácia, odhad bázy):



Príklad: separácia obrazov

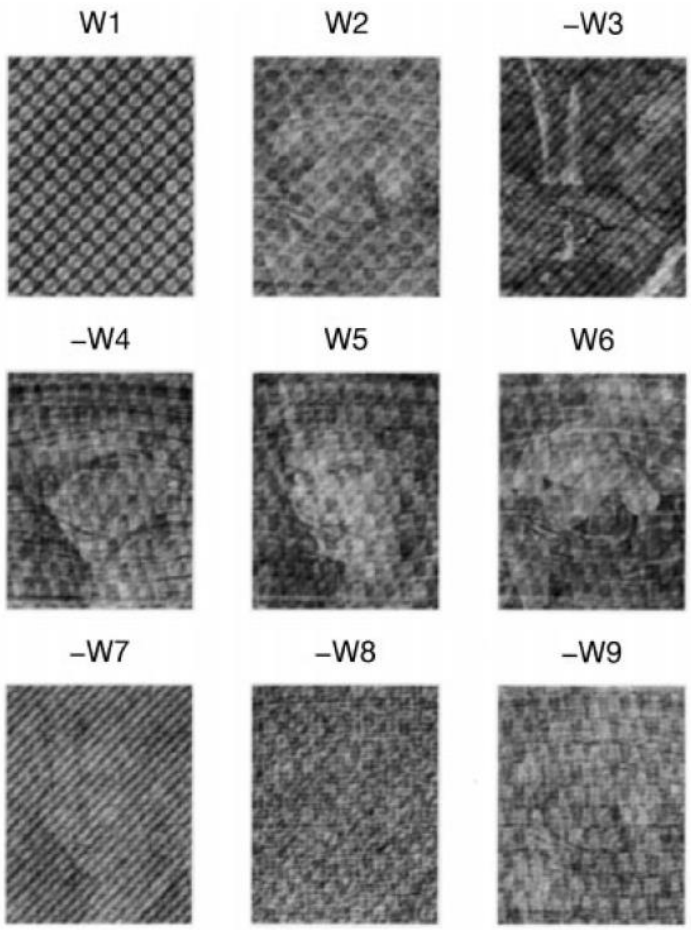


originály obrazov



lineárne kombinácie zdrojových obrazov

Karhunen,J.,Oja,E.,Wang,L.,Vigário,R.,Joutsensalo,J.: A Class of Neural Networks for Independent Component Analysis, IEEE Trans. on Neural Networks, Vol.8, No.3, May 1997, str. 486-503



zložkové obrazy po vyhladzovaní pomocou PCA

zložkové obrazy po separácii

Karhunen,J.,Oja,E.,Wang,L.,Vigário,R.,Joutsensalo,J.: A Class of Neural Networks for Independent Component Analysis, IEEE Trans. on Neural Networks, Vol.8, No.3, May 1997, str. 486-503

ICA A ICA SIETE

8.1 Analýza nezávislých komponentov ICA

Analýza nezávislých komponentov, *ICA* ("independent component analysis") [Com94] je rozšírenie štandardnej analýzy hlavných komponentov PCA. ICA sa využíva hlavne pre *separáciu* zdrojových signálov z ich lineárnych kombinácií. V tomto prípade sú objektom záujmu iba zdrojové signály, ktoré korešpondujú s koeficientami ICA. *Kompletnú ICA* (t.j. *vyhladzovanie*, *separáciu zdrojov* a *odhad bázových vektorov ICA*) možno robiť aj využitím viacvrstvových dopredných neurónových sietí. Sieť pre kompletnú ICA pozostáva z vyhladzovacej ("whitening") vrstvy, vrstvy pre separáciu a vrstvy pre odhad bázových vektorov ICA. Táto problematika je opisovaná v prácach [Com94], [Jut91], [Kar94], [Oja95], [Kar97]. Tieto práce sú príkladom jedného z novších trendov výskumu v oblasti neurónových sietí, keď sa skúmajú rôzne formy učenia bez učiteľa presahujúce rámec PCA [Kar95].

8.2 Model dát pre ICA a separáciu zdrojov

Predpokladajme, že existuje M zdrojových signálov $s_1(n),\ldots,s_M(n),\ n=1,2,\ldots$, ktoré majú nulovú strednú hodnotu, sú vzájomne štatisticky nezávislé pre každé n a ktoré majú skalárne hodnoty [Kar97]. Nezávislosť je definovaná tak, že vzájomná hustota pravdepodobnosti zdrojových signálov je súčinom hustôt pravdepodobnosti jednotlivých zdrojov:

$$p\left[s_1(n),s_2(n),\ldots,s_M(n)\right]=\prod_{i=1}^{M}p_i\left[s_i(n)\right] \tag{8.1}$$

Konkrétnou formou zdrojových signálov môžu byť navzorkované rečové signály; v tomto prípade n znamená diskrétny čas. Iným príkladom sú obrazy; v tomto prípade je n dvojrozmerné - znamená pixel a index i sa vzťahuje na jednotlivé obrazy.

Predpokladáme tiež, že originály zdrojov nemáme k dispozícii a jediné čo máme je množina zašumených lineárnych kombinácií $x_1(n),\ldots,x_L(n)$, kde

$$x_j(n)=\sum_{i=1}^{M}s_i(n)a_{ij}+v_j(n) \tag{8.2}$$

a $v_j(n)$ je šum. Koeficienty a_{ij} sú neznáme a predpokladáme, že všetky lineárne kombinácie sú rôzne.

Nech teraz $\mathbf{x}(n)=\left[x_1(n),\ldots,x_L(n)\right]^T$ je L-rozmerný vektor vytvorený z lineárnych kombinácií podľa (8.2) v diskrétnom čase (alebo bode) n. Podľa (8.2) môžeme model pre ICA zapísať vo vektorovom tvare

$$\mathbf{x}(n) = \mathbf{A}\mathbf{s}(n) + \mathbf{v}(n) = \sum_{i=1}^{M} s_i(n)\mathbf{a}_i + \mathbf{v}(n) \tag{8.3}$$

kde $\mathbf{s}(n) = \left[s_1(n),\ldots,s_M(n)\right]^T$ je vektor zdrojov pozostávajúci z M zdrojových signálov (*nezávislých komponentov*) $s_i(n), i = 1,\ldots,M$ v čase (bode) n. Matica $\mathbf{A} = \left[\mathbf{a}_1,\ldots,\mathbf{a}_M\right]$ je konštantná "*zmiešavacia matica*" ("mixing matrix") typu $L \times M$, ktorej stĺpce $\mathbf{a}_i$ sú *bázové vektory ICA* a $\mathbf{v}(n)$ označuje prípadne prítomný aditívny šum. Šum sa často v (8.3) vynecháva, pretože je zvyčajne nemožné rozlíšiť šum od zdrojových signálov.

V prípade *separácie zdrojov* je úlohou nájsť zdroje $\{s_i(n)\}$, ak poznáme iba vektory $\mathbf{x}(n)$ a počet zdrojov M. V prípade *kompletnej ICA* je úlohou nájsť tiež bázové vektory $\mathbf{a}_i, i = 1,\ldots,M$ pre ICA.

Predpoklady pri ICA a separácii zdrojov pre model (8.3) môžeme presnejšie formulovať nasledovne [Kar97]:

1) $\mathbf{A}$ je konštantná matica s plnou stĺpcovou hodnosťou. Počet zdrojov M teda neprevyšuje L, čo je dimenzia vektorov $\mathbf{x}(n)$. Zvyčajne sa predpokladá, že M je vopred známe. Ak $M < L$ a nie je prítomný žiadny šum, potom vektory $\mathbf{x}(n)$ ležia v M-rozmernom podpriestore, ktorý je lineárnym obalom bázových vektorov ICA.
2) Zdrojové signály (koeficienty) $s_i(n), i = 1,\ldots,M$ musia byť pre každé n vzájomne štatisticky nezávislé (alebo v praxi tak nezávislé, ako je len možné).
3) Každý zdrojový signál $s_i(n)$ je stacionárny stochastický proces s nulovou strednou hodnotou. Iba jeden zo zdrojových signálov $s_i(n)$ môže mať gaussovské rozdelenie pravdepodobnosti. Toto vyplýva zo skutočnosti, že lineárna kombinácia gaussovských zdrojových signálov je tiež gaussovská. Je teda nemožné vzájomne separovať niekoľko gaussovských zdrojov.

8.3 Separácia zdrojov

Pri separácii zdrojov ("blind source separation") je snahou získať nezávislé zdrojové signály $\{s_i(n)\}, n = 1,\ldots$ definované v (8.3) z vektorov $\mathbf{x}(n)$ [Kar97]. V takomto prípade sa zvyčajne nezaujímame o bázové vektory ICA $\mathbf{a}_i$. Tieto techniky sú užitočné napr. pri vylepšovaní rečových signálov a komunikáciách. Existuje viacero separačných algoritmov, neurónové siete môžu byť užitočné pre adaptívne algoritmy.

Pri adaptívnej separácii zdrojov sa upravuje *separačná matica* $\mathbf{B}(n)$ typu $M \times L$ tak, že M-rozmerný vektor

$$\mathbf{y}(n) = \mathbf{B}(n)\mathbf{x}(n) \tag{8.4}$$

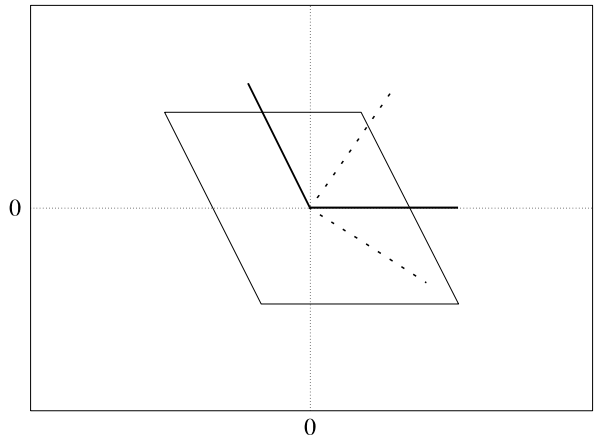
sa stane odhadom $\mathbf{y}(n) = \hat{\mathbf{s}}(n)$ originálnych nezávislých zdrojových signálov. Pri platnosti uvedených podmienok 1) až 3) odhad $\hat{s}_i(n)$ $\boldsymbol{i}$-teho zdrojového signálu sa môže objaviť v ktorejkoľvek zložke $y_j(n)$ vektora $\mathbf{y}(n)$. Je tiež nemožné určiť amplitúdy zdrojových signálov $s_i(n)$ z modelu (8.3) bez prídavných predpokladov. Namiesto normovania bázových vektorov

$\mathbf{a}_i$ sa pri separácii zdrojov predpokladá, že každý zdrojový signál $s_i(n)$ má jednotkový rozptyl. Pri separačných algoritmoch sa často vektory $\mathbf{x}(n)$ predspracujú vyhladzovaním, takže ich korelačné matice sa stanú jednotkovými maticami. Po vyhladení bude separačná matica v (8.4) ortogonálna, čiže $\mathbf{B}^T(n)\mathbf{B}(n) = \mathbf{I}_M$. Dôsledkom sú jednoduchšie separačné algoritmy a zároveň sú rozptyly odhadov zdrojov $\hat{s}_i(n)$ automaticky normalizované na jednotkovú veľkosť.

8.4 Analýza nezávislých komponentov

Spomínali sme už, že teraz sa zaujímame o techniky idúce za rámec PCA. Často sa nazývajú aj metódy pre *nelineárnu PCA*. Hlavným dôvodom pre intenzívne štúdium týchto metód je skutočnosť, že aj keď štandardná PCA je optimálna pre aproximáciu dát v zmysle strednej kvadratickej chyby, v niektorých prípadoch nedáva zmysluplnú reprezentáciu dát. Pri PCA sú dáta reprezentované pomocou ortonormálnej bázy určenej výlučne štatistikou druhého rádu (kovarianciami) vstupných dát. Takáto reprezentácia je účelná pre gaussovské dáta. Negaussovské dáta však obsahujú mnoho prídavnej informácie vo svojej štatistike vyššieho rádu. Pre nelineárnu PCA nie je možné riešenie vyjadriť v analytickom tvare, a tak je možné s výhodou použiť neurosieťové algoritmy učenia [Kar97].

V porovnaní s PCA, keď je hlavnou požiadavkou *nekorelovanosť* koeficientov, pri ICA vyžadujeme *nezávislosť* koeficientov. Z toho vyplýva, že pri výpočte ICA je treba využívať štatistiku vyššieho rádu. Tiež platí, že vo fáze učenia musia byť použité vhodné nelinearity, hoci konečné vstupno-výstupné mapovanie je lineárne. V mnohých prípadoch ICA poskytuje účelnejšiu reprezentáciu dát ako PCA.



Obr. 8.1 *Ilustrácia rozdielu medzi ICA a PCA*

V prípade PCA by mal model dát rovnakú formu ako (8.3), ale na koeficienty $s_i(n)$ by sa kládla požiadavka postupnej maximálnej variancie (rozptylu) $E\left[s_i^2(n)\right]$ a bázové vektory $\mathbf{a}_i$ by museli byť ortonormálne. Pri ICA požadujeme nezávislosť koeficientov $s_i(n)$ (postupná maximálna nezávislosť pri projekcii dát na smery určené bázovými vektormi) a bázové vektory

$\mathbf{a}_i$ pre ICA zvyčajne nie sú ortogonálne. Projekcie dát na bázové vektory ICA sú negaussovské. Jednoduchý príklad ilustrujúci rozdiely medzi ICA a PCA je na obr. 8.1. Dátové vektory sú rovnomerne rozdelené vnútri paralelogramu. Neprerušované čiary znázorňujú dva bázové vektory ICA, prerušované čiary znázorňujú ortogonálne bázové vektory PCA. V tomto prípade je jasné, že bázové vektory ICA lepšie charakterizujú dáta.

Pri ICA sa bázové vektory odhadujú omnoho ťažšie ako pri PCA; ich využitie pri reprezentácii či aproximácii signálov nie je také pohodlné ako pri PCA, pretože sú neortogonálne. Ak by bola matica $\mathbf{A}$ z (8.3) známa, metódou najmenších štvorcov by bolo možné dostať aproximáciu

$$\hat{\mathbf{x}}(n) = \mathbf{A}\left(\mathbf{A}^T\mathbf{A}\right)^{-1}\mathbf{A}^T\mathbf{x}(n) \tag{8.5}$$

Problémom pri ICA je spoľahlivé overenie podmienky nezávislosti (8.1). Priamo sa to urobiť nedá (hustoty pravdepodobnosti zdrojov nie sú známe). Zaviedli sa preto tzv. *kontrastové funkcie* [Com94], ale aj pri nich sa vyžadujú náročné výpočty využívajúce odhady štatistík vyššieho rádu, čo vedie ku komplikovaným výpočtovo náročným algoritmom [Kar97]. Našťastie často stačí použiť jednoduchú štatistiku vyššieho rádu, tzv. *kurtosis* (je to kumulant štvrtého rádu) [Kar97]; v slovenskej literatúre je veľmi podobne definovaný koeficient strmosti (špicatosti), exces, rozdiel je len v konštantách (v ďalšom budeme používať pojem exces). Pre i -ty zdrojový signál s_i je exces definovaný ako

$$\mathrm{cum}\left[s_i^4\right] = E\left[s_i^4\right] - 3\left(E\left[s_i^2\right]\right)^2 \tag{8.6}$$

Ak je zdroj s_i *gaussovský*, potom jeho exces $\mathrm{cum}\left[s_i^4\right] = 0$. Zdrojové signály, ktoré majú záporný exces, sa často nazývajú *subgaussovské*; ich rozdelenie pravdepodobnosti je plochšie ako pre gaussovské signály. Zdroje, ktoré majú kladný exces (*supergaussovské signály*), majú rozdelenie s užším vrcholom a dlhšími dobehmi ako gaussovské rozdelenie.

Delenie zdrojov na subgaussovské a supergaussovské je veľmi dôležité, pretože separačné schopnosti mnohých algoritmov rozhodujúcim spôsobom závisia na tejto vlastnosti. Dá sa ukázať, že pre vstupné vektory predspracované vyhladením sa separačnou maticou $\mathbf{B}$ definovanou v (8.4) maximalizuje jednoduchá kontrastová funkcia

$$J_1(\mathbf{y}) = \sum_{i=1}^{M}\left|\mathrm{cum}\left[y_i^4\right]\right| = \sum_{i=1}^{M}\left|E\left[y_i^4\right] - 3\left(E\left[y_i^2\right]\right)^2\right| \tag{8.7}$$

ak má exces rovnaké znamienko pre všetky zdrojové signály $s_i(n), i = 1,\ldots,M$. Pre vyhladené vstupné vektory $\mathbf{x}$ a ortogonálne separačné matice je $E\left[y_i^2\right] = 1$ a $\mathrm{cum}\left[y_i^4\right] = E\left[y_i^4\right] - 3$. Teda kritérium (8.7) je maximalizované, ak suma momentov štvrtého rádu

$$J_2(\mathbf{y}) = \sum_{i=1}^{M} E\left[y_i^4\right] \tag{8.8}$$

je minimalizovaná pre zdroje, ktoré majú záporný exces a maximalizovaná pre zdroje, ktoré majú kladný exces. Ďalej už budeme mať na mysli kritérium (8.8), pretože je dostatočne jednoduché a dá sa priamo aplikovať na nelineárne PCA algoritmy učenia pre neurónové siete.

8.5 Neurónové siete pre ICA

Pozrime sa teraz na neurosieťový výpočet ICA [Kar97]. Odhad ICA podľa (8.3) označme teraz ako

$$\mathbf{x}(n) = \mathbf{Q}\mathbf{y}(n) + \mathbf{v}'(n) \tag{8.9}$$

kde matica $\mathbf{Q}$ typu $L \times M$ je odhad matice $\mathbf{A}$ bázy ICA, $\mathbf{y}(n)$ je odhad zdroja (nezávislého komponentu) $\mathbf{s}(n)$ a $\mathbf{v}'(n)$ je šum alebo chybový člen. Prvou úlohou je separácia zdrojov, čiže odhad vektorov $\mathbf{y}(n)$. Dá sa to urobiť pomocou učenia matice $\mathbf{B}$ zo vzťahu (8.4) za použitia nejakého vhodného algoritmu. Po tomto kroku by mali byť zložky vektora $\mathbf{y}(n)$ čo najviac nezávislé. Pre naučenie matice $\mathbf{Q}$ sa potom minimalizuje stredná kvadratická chyba $E\left[\|\mathbf{v}'(n)\|^2\right] = E\left[\|\mathbf{x}(n) - \mathbf{Q}\mathbf{y}(n)\|^2\right]$ vzhľadom na $\mathbf{Q}$.

Takýto postup sa dá reprezentovať doprednou sieťou konfigurácie $L - M - L$, ktorá je na obr. 8.2. L vstupov do siete je L prvkov vektora $\mathbf{x}$. Váhy medzi vstupnou a skrytou vrstvou sú reprezentované maticou $\mathbf{B}$ typu $M \times L$ a váhy medzi skrytou a výstupnou vrstvou maticou $\mathbf{Q}$ typu $L \times M$. Odhad ICA sa dá urobiť neurónovou sieťou z obr. 8.2 v dvoch krokoch:

3) Naučenie váhovej matice $\mathbf{R} = \mathbf{B}$, pre ktorú sú komponenty $\mathbf{y} = \mathbf{R}\mathbf{x}$ tak nezávislé, ako je to len možné
4) Naučenie váhovej matice $\mathbf{Q}$, ktorá minimalizuje chybu $E\left[\|\mathbf{x} - \mathbf{Q}\mathbf{y}\|^2\right]$

Ak použijeme vyhladzovanie, krok 1) sa rozdelí na dva kroky. Najprv sa vyhladia vstupné vektory $\mathbf{x}(n)$ aplikovaním transformácie

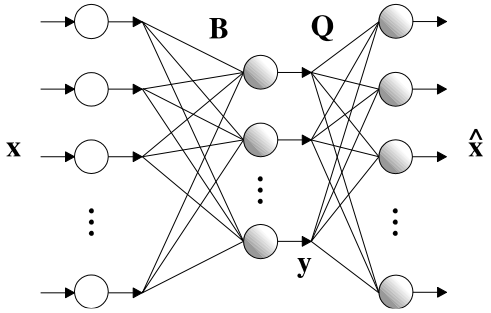
$$\mathbf{v}(n) = \mathbf{V}\mathbf{x}(n) \tag{8.10}$$

kde $\mathbf{v}(n)$ je vyhladený vektor a $\mathbf{V}$ je *vyhladzovacia matica* (“whitening matrix”) typu $M \times L$. Ak $L > M$, potom $\mathbf{V}$ súčasne redukuje dimenziu vektorov z L na M. Potom sa separujú zdroje (nezávislé komponenty)

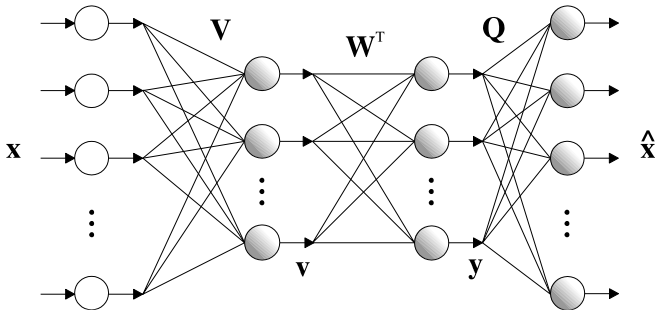
$$\mathbf{y}(n) = \mathbf{W}^T\mathbf{v}(n) \tag{8.11}$$

$\mathbf{W}^T$ tu značí ortonormálnu ($\mathbf{W}^T\mathbf{W} = \mathbf{I}_M$) separačnú maticu typu $M \times M$. Neurónová sieť

zodpovedajúca tomuto postupu je na obr. 8.3, kde $\mathbf{B} = \mathbf{W}^T\mathbf{V}$.



Obr. 8.2 *Dopredná sieť pre výpočet ICA (bez vyhladzovania)*



Obr. 8.3 *Dopredná sieť pre úplnú ICA (vyhladzovanie, separácia, odhad bázy)*

Pre takéto siete často platí $M = L$, takže v skrytej vrstve sa nerobí kompresia. Sú tu potrebné aj spätnoväzbové spojenia, ale len počas učenia. Po skončení učenia je sieť čisto dopredná. Aj keď model (8.3) je lineárny, pri učení separačnej matice $\mathbf{B}$ alebo $\mathbf{W}^T$ sa musia použiť nelinearity. Tie zavádzajú do výpočtu štatistiku vyššieho rádu, čo je potrebné k dosiahnutiu nezávislosti. Štatistika druhého rádu používaná pri PCA môže poskytnúť iba dekoreláciu.

Sieť na obrázku 8.3 robí úplnú ICA, t.j. vyhladzovanie, separáciu a odhad bázových vektorov ICA. Ak je úlohou iba separácia signálov, tak posledná vrstva na odhad bázových vektorov ICA nie je potrebná.

8.6 Učenie neurónových sietí pre ICA

Vyhladzovanie

Pred privedením vstupných vektorov $\mathbf{x}(n)$ do siete sa z nich odpočíta stredná hodnota, čo normalizuje dáta vzhľadom na štatistiku prvého rádu. Tiež sa často dáta normalizujú vzhľadom na štatistiku druhého rádu použitím transformácie (8.10). Zložky vyhladených vektorov $\mathbf{v}(n)$ musia byť navzájom nekorelované a normalizované tak, aby mali jednotkový rozptyl. Toto je ekvivalentné s požiadavkou, aby korelačná matica $E\left[\mathbf{v}(n)^T\mathbf{v}(n)\right]$ bola jednotkovou maticou $\mathbf{I}_M$. Nekorelovanosť je nevyhnutným predpokladom pre silnejšiu podmienku nezávislosti. Po

vyhladení sa stane separácia jednoduchšou. Je mnoho možností, ako dekorelovať a vyhladiť dáta (za predpokladu, že $L \geq M$).

Pre vyhladzovanie sa často používa štandardná PCA. Vyhladzovacia matica v takomto prípade je

$$\mathbf{V} = \mathbf{U}^{-1/2}\mathbf{\Lambda}^T \tag{8.12}$$

kde $\mathbf{\Lambda}$ je diagonálna matica typu $M \times M$, $\mathbf{\Lambda} = \mathrm{diag}\left[\lambda_1,\ldots,\lambda_M\right]$ a $\mathbf{U}$ je matica typu $L \times M$, $\mathbf{U} = \left[\mathbf{u}_1,\ldots,\mathbf{u}_M\right]$, kde λ_i je i -te najväčšie vlastné číslo korelačnej matice $E\left[\mathbf{x}(n)^T\mathbf{x}(n)\right]$ a $\mathbf{u}_i$ je zodpovedajúci i -ty vlastný vektor.

Na vyhladzovanie pomocou PCA možno buď použiť štandardné programové vybavenie, alebo inou možnosťou je urobiť neurosieťový výpočet (napr. algoritmy GHA alebo APEX, prípadne iné neurosieťové algoritmy sumarizované v [Dia96]).

Separácia

Kľúčovou a najťažšou časťou pri ICA je naučenie separačnej matice $\mathbf{B}(n)$ zavedenej v (8.4). Môže sa učiť buď priamo alebo (ak sa využíva aj vyhladzovanie) vo forme $\mathbf{B}(n) = \mathbf{W}^T(n)\mathbf{V}(n)$. Existuje mnoho separačných algoritmov; tu stručne spomenieme niektoré podľa [Kar97], ktoré sú vhodné pre naučenie matice $\mathbf{W}^T(n)$ alebo $\mathbf{B}(n)$.

Robustné PCA podpriestorové pravidlo ("robust PCA subspace rule") má tvar

$$\begin{aligned}\mathbf{W}(n+1) &= \mathbf{W}(n) + \mu(n)\left[\mathbf{v}(n) - \mathbf{W}(n)\mathbf{y}(n)\right]\mathbf{g}\left(\mathbf{y}^T(n)\right) \\ &= \mathbf{W}(n) + \mu(n)\left[\mathbf{I} - \mathbf{W}(n)\mathbf{W}^T(n)\right]\mathbf{v}(n)\mathbf{g}\left(\mathbf{v}^T(n)\mathbf{W}(n)\right)\end{aligned} \tag{8.13}$$

Tu a aj v ďalšom $\mathbf{g}(\mathbf{y})$ je vektor, ktorého i -ta zložka je $g(y_i)$ a $g(\cdot)$ je nelineárna, väčšinou nepárna funkcia (napr. kubická, alebo hyperbolický tangens), $\mu(n)$ je parameter učenia.

Nelineárne PCA podpriestorové pravidlo ("nonlinear PCA subspace rule) má tvar

$$\mathbf{W}(n+1) = \mathbf{W}(n) + \mu(n)\left[\mathbf{v}(n) - \mathbf{W}(n)\mathbf{g}\left(\mathbf{y}(n)\right)\right]\mathbf{g}\left(\mathbf{y}^T(n)\right) \tag{8.14}$$

Bigradientový algoritmus ("bigradient algorithm") je vo forme

$$\mathbf{W}(n+1) = \mathbf{W}(n) + \mu(n)\mathbf{v}(n)\mathbf{g}\left(\mathbf{y}^T(n)\right) + \gamma(n)\mathbf{W}(n)\left[\mathbf{I} - \mathbf{W}^T(n)\mathbf{W}(n)\right] \tag{8.15}$$

kde $\gamma(n)$ je iný parameter učenia.

EASI ("equivariant adaptive separation via independence"*) algoritmus* má tvar

$$\mathbf{B}(n+1) = \mathbf{B}(n) - \mu(n)\left[\frac{\mathbf{y}(n)\mathbf{y}^T(n) - \mathbf{I}}{1+\mu(n)\mathbf{y}^T(n)\mathbf{y}(n)} + \frac{\mathbf{g}(\mathbf{y}(n))\mathbf{y}^T(n) - \mathbf{y}(n)\mathbf{g}(\mathbf{y}^T(n))}{1+\mu(n)\mathbf{y}^T(n)\mathbf{g}(\mathbf{y}(n))}\right]\mathbf{B}(n) \quad (8.16)$$

Pre zavedenie štatistiky ešte vyšších rádov sa môže v (8.16) použiť ešte iná nelineárna funkcia $h(\cdot)$, čo vedie ku *generalizovanému EASI algoritmu*:

$$\mathbf{B}(n+1) = \mathbf{B}(n) - \mu(n)\left[\mathbf{y}(n)\mathbf{y}^T(n) - \mathbf{I} + \mathbf{g}(\mathbf{y}(n))\mathbf{h}(\mathbf{y}^T(n)) - \mathbf{h}(\mathbf{y}(n))\mathbf{g}(\mathbf{y}^T(n))\right]\mathbf{B}(n) \quad (8.17)$$

Činnosť všetkých uvedených separačných algoritmov závisí na mnohých faktoroch, ako je napr. zmiešavacia matica, zdrojové signály, zvolené parametre učenia a nelinearity. Bližšie podrobnosti o týchto faktoroch poskytuje [Kar97] Je možné použiť aj iné algoritmy, avšak tu uvedené sú podľa [Kar97] použiteľné pre PCA neurónové siete a patria medzi najjednoduchšie. Všetky tieto algoritmy vyžadujú, aby originálne zdrojové signály mali exces rovnakého znamienka:
$\operatorname{sgn}\left(\operatorname{cum}\left[s_i^4\right]\right) = +1$ alebo -1 pre $i = 1,\ldots,M$.

Odhad bázových vektorov ICA

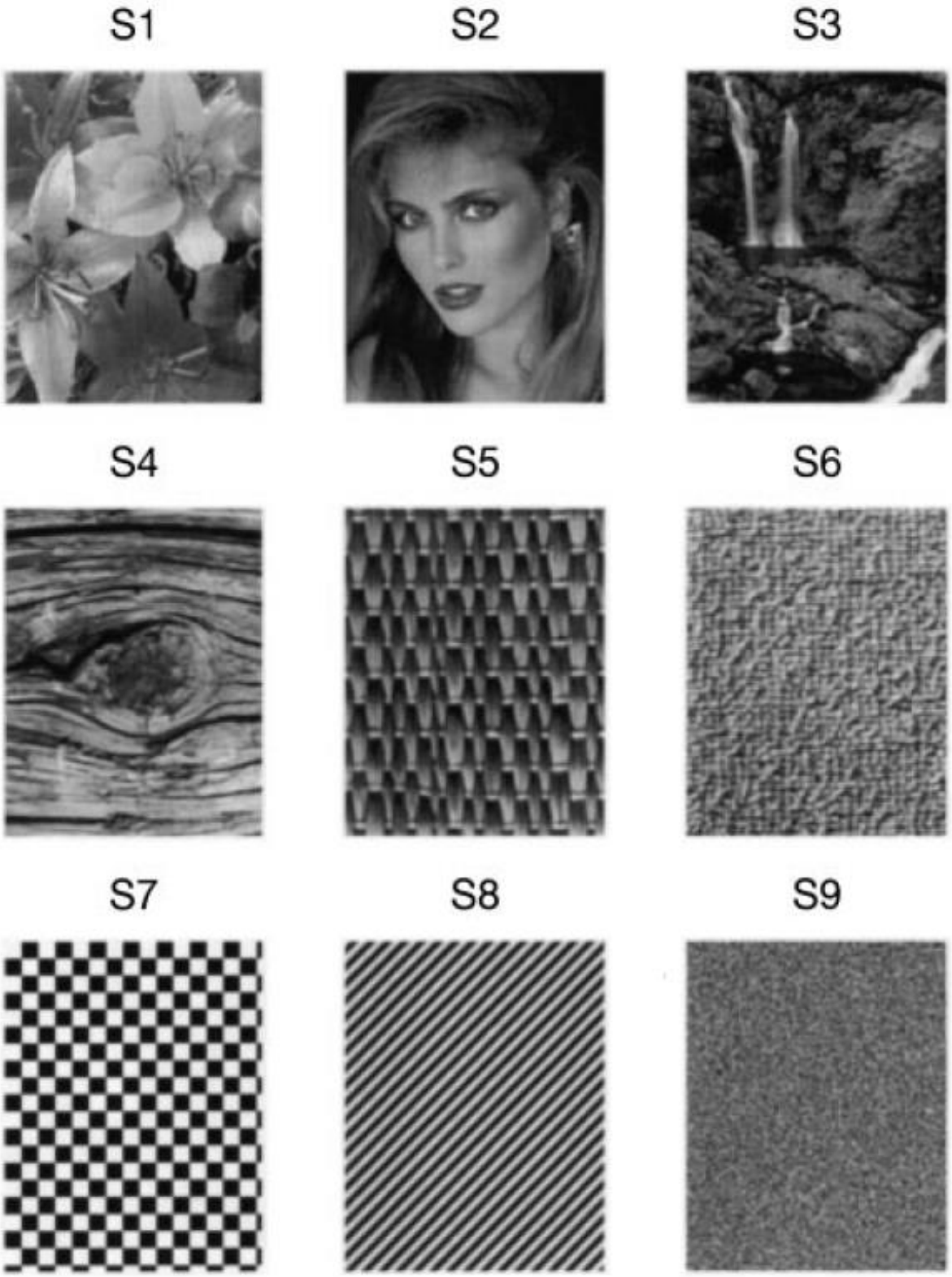
Našou úlohou je teraz odhadnúť bázové vektory ICA $\mathbf{a}_i$, $i = 1,\ldots,M$.

Štandardné riešenie bez využitia neurónových sietí môže byť založené na pseudoinverzných maticiach. Predpokladajme, že matica $\mathbf{B}(n)$ skonvergovala k separačnej matici $\mathbf{B}$. Ak $\mathbf{x}(n)$ bolo určené priamo podľa (8.4), potom (pseudoinverzným) riešením je

$$\hat{\mathbf{x}}(n) = \hat{\mathbf{A}}\mathbf{y}(n) = \mathbf{B}^T\left(\mathbf{B}\mathbf{B}^T\right)^{-1}\mathbf{y}(n) = \sum_{j=1}^{M}\hat{s}_j(n)\hat{\mathbf{a}}_j \quad (8.18)$$

kde $\hat{\mathbf{a}}_j$ je j-ty riadok stĺpec matice $\hat{\mathbf{A}} = \mathbf{B}^T\left(\mathbf{B}\mathbf{B}^T\right)^{-1}$ rozmerov $L \times M$. Keď porovnáme (8.18) s (8.3) tak vidíme, že vektory $\hat{\mathbf{a}}_j$ sú žiadanými odhadmi bázových vektorov ICA. Tieto odhady sa môžu vhodne normalizovať a usporiadať.
Ak sa použilo vyhladzovanie pomocou PCA podľa (8.12), potom odhad bázovej matice ICA možno zjednodušiť do tvaru

$$\hat{\mathbf{A}} = \mathbf{U}\,\mathbf{\Lambda}^{1/2}\mathbf{W} \quad (8.19)$$



Obr. 8.4 *Originály obrazov [Kar97]*

Nenormalizovaný i -ty bázový vektor ICA je teda $\hat{\mathbf{a}}(i) = \mathbf{U}\,\mathbf{\Lambda}^{1/2}\mathbf{w}_i$, kde $\mathbf{w}_i$ je i -ty stĺpec matice $\mathbf{W}$, ktorého kvadrát normy je $\left\|\hat{\mathbf{a}}_i\right\|^2 = \mathbf{w}_i^T\mathbf{U}\mathbf{w}_i$.

Čisto *neurosieťový algoritmus* pre odhad bázových vektorov ICA, ktorý nezahŕňa žiadne inverzie matíc ani druhé odmocniny, je založený na minimalizácii strednej kvadratickej chyby $E\left[\left\|\mathbf{x}(n)-\mathbf{Q}\mathbf{y}(n)\right\|^2\right]$ za predpokladu, že zložky vektora $\mathbf{y}$ sú vzájomne štatisticky nezávislé. To vedie k *stochastickému gradientovému algoritmu* ("stochastic gradient algorithm")

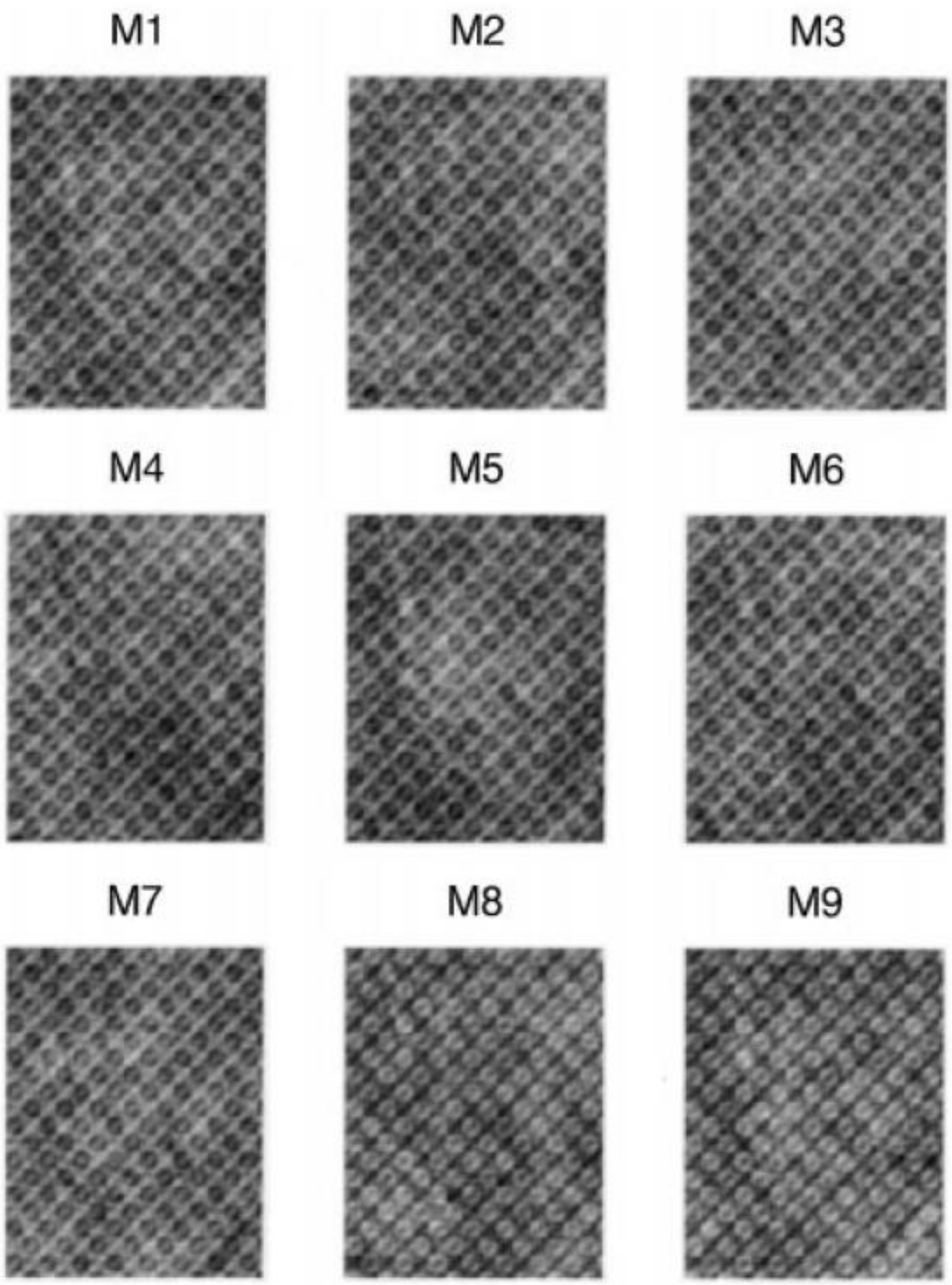
$$\mathbf{Q}(n+1)=\mathbf{Q}(n)+\mu(n)\left[\mathbf{x}(n)-\mathbf{Q}(n)\mathbf{y}(n)\right]\mathbf{y}^T(n) \tag{8.20}$$

kde $\mu(n)>0$.

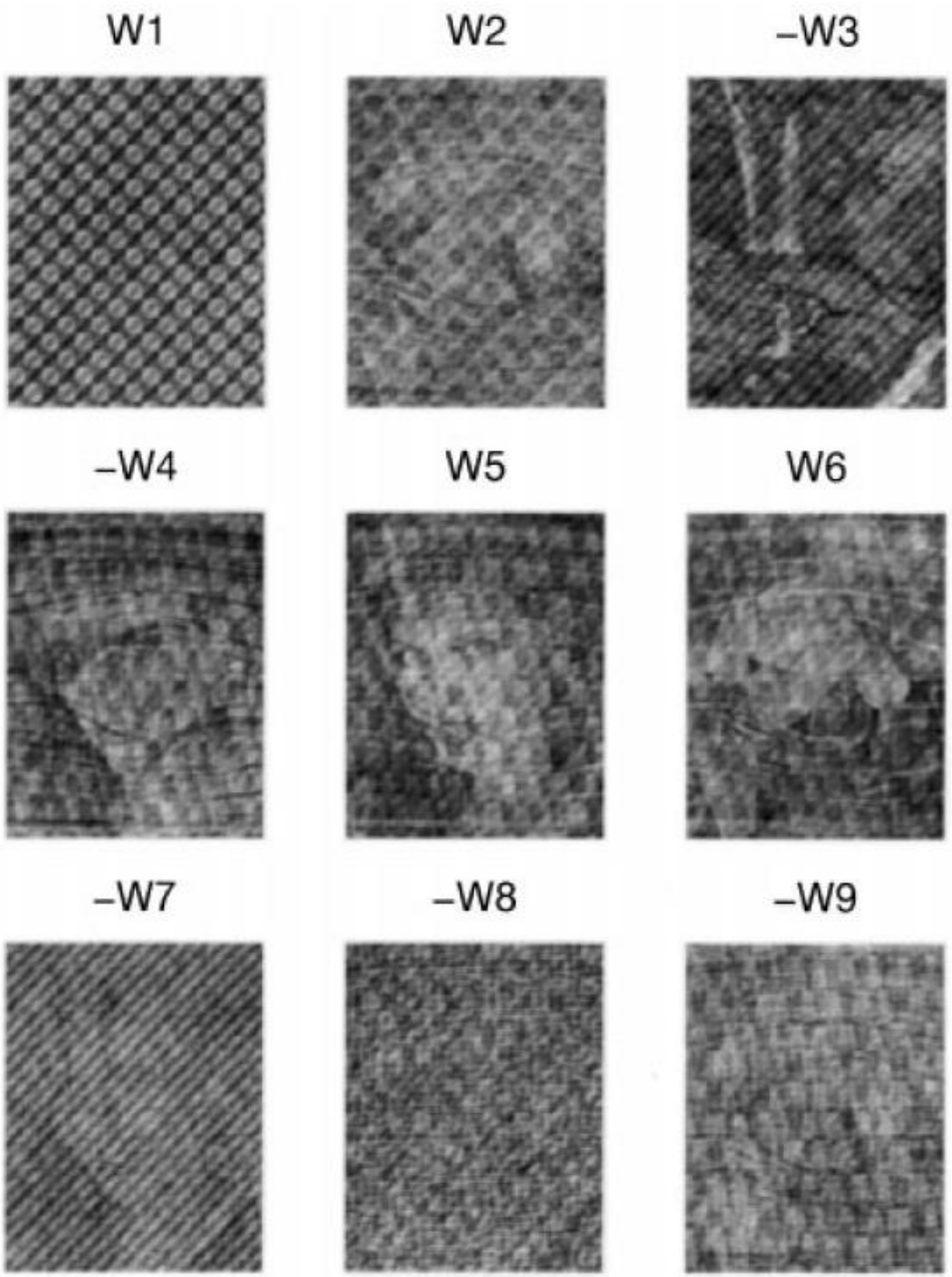
8.7 Separácia obrazov

Pozrime sa teraz na experiment so separáciou obrazov podľa [Kar97]. Bolo použitých deväť zdrojových obrazov, ktoré sú na obr. 8.4. Prvé tri obrazy (S1-S3) sú prirodzené scény, druhé tri (S4-S6) sú textúry a posledné tri (S7-S9) sú umelo generované obrazy (S8 je dvojrozmerný sínusový signál a S9 je rovnomerne rozdelený šum). Vzájomná štatistická nezávislosť jednotlivých obrazov sa nijako netestovala. Všetky zdrojové obrazy okrem S3 majú záporný exces; exces obrazu S3 má malú kladnú hodnotu, takže exces ľubovoľných dvoch obrazov je vždy záporný. Rozmery obrazov sú 387x306 - z každého obrazu bol vytvorený vektor so 118422 prvkami. Každý 9-rozmerný zdrojový vektor $\mathbf{s}(n)$ v modeli ICA (8.3) obsahuje n-té zložky vektorovej formy zdrojových obrazov. Tieto zložky boli vynásobené neortogonálnou bázovou maticou ICA $\mathbf{A}$ rozmerov 9x9 s plnou hodnosťou. Výsledkom bolo 118422 vektorov $\mathbf{x}(n)$, ktoré boli použité v ďalšej simulácii. Deväť zložiek zmiešaných (lineárne skombinovaných) vektorov $\mathbf{x}(n)$ je zobrazených na obr. 8.5. Vyzerajú veľmi podobne a neprezrádzajú nič o štruktúre originálnych zdrojových obrazov.
Obr. 8.6 ukazuje situáciu po vyhladzovaní. Každý z deviatich obrazov tu obsahuje jednu zložku vyhladených vektorov $\mathbf{v}(n), n=1,\ldots,188422$. Použitá bola vyhladzovacia matica PCA podľa (8.12), ktorej výpočet sa urobil využitím štandardného programového vybavenia. Na týchto obrazoch je už možné vidieť istú štruktúru, ale ešte stále majú veľmi ďaleko k originálnym zdrojom.

Na separáciu signálov bolo použité nelineárne podpriestorové PCA pravidlo (8.14). Použilo sa 20 prezentácií vektorov, parameter $\mu(n)$ pomaly klesal z inicializačnej hodnoty 0,0005. Bola použitá funkcia $g(\cdot)=tgh(\cdot)$. Na obr. 8.7 sú obrazy zložiek vektorov $\mathbf{y}(n), n=1,\ldots,118422$. Tieto vektory sú odpoveďami na vektory $\mathbf{x}(n), n=1,\ldots,118422$ ktoré boli privedené do ICA siete po jej učení.
Obrazy na obr. 8.7 boli preškálované, aby ich rozsah úrovní šedej bol rovnaký ako pre originály z obr. 8.4 a v niektorých prípadoch bolo zmenené znamienko. Výsledky separácie sú dobré, hoci isté zmiešanie je ešte predsa len možné vidieť.



Obr. 8.5 *Zložkové obrazy zmiešaných vektorov (sú to lineárne kombinácie zdrojových obrazov z obr. 8.4) [Kar97]*



Obr. 8.6 *Zložkové obrazy po vyhladzovaní pomocou PCA [Kar97]*

Je jasné, že niektoré zdrojové originálne obrazy nie sú naozaj nezávislé. Skúsenosť však hovorí, že v praxi je možné dosiahnuť primerané separačné výsledky aj v prípade, keď zdroje nie sú štatisticky nezávislé [Kar97]. Obrazy S1-S3 dokonca nie sú stacionárne. Výsledky

separácie je pravdepodobne možné vylepšiť pridaním ďalšej separačnej vrstvy do siete podľa obr. 8.3, kde by sa pre štatistiku vyššieho rádu použila iná nelinearita.

Obr. 8.7 *Zložkové obrazy po separácii [Kar97]*

Autori [Kar97] odhadovali aj bázové vektory ICA podľa (8.18). Vypočítali uhly medzi reálnymi a odhadnutými bázovými vektormi. Tieto uhly boli 0.0, 0.0, 0.8, 3.6, 4.8, 9.4, 15.3, 17.2 a 27.6 stupňov. Je zjavné, že veľké uhly zodpovedajú bázovým vektorom prirodzených obrazov S1-S3, ktoré nie sú skutočne nezávislé a pre ktoré výsledky separácie podľa obr. 8.7 nie sú perfektné. Najmenšie uhly zodpovedajú umelo vytvoreným zdrojom S7-S9 - tie sú približne nezávislé.

Porovnaním obr. 8.6 a 8.7 je možné demonštrovať užitočnosť nelinearít pri algoritmoch učenia pre výpočet PCA. Výsledky na obr. 8.6 ukazujú, čo je možné dosiahnuť pri takejto aplikácii štandardnou PCA.

Ako zhrnutie možno povedať, že v ľubovoľnej z troch vrstiev ICA siete je možné použiť buď neurosieťový algoritmus, alebo algoritmus nevyužívajúci neurónové siete. Praktickým pravidlom je, že neurosieťové učenie sa odporúča iba pre kritickú časť - separáciu zdrojov. Pre vyhladzovanie a odhad bázových vektorov ICA sú k dispozícii štandardné numerické metódy. Nič však nebráni použitiu niektorých z uvedených neurosieťových algoritmov.