

DIZERTAČNÍ PRÁCE

Použití neuronových sítí v analýze obrazu

Mgr. Marek Malý

Katedra elektroniky a vakuové fyziky
Matematicko-fyzikální fakulta Univerzity Karlovy

Školitel

prof. RNDr. Rudolf Hrach, DrSc.

Katedra elektroniky a vakuové fyziky
MFF UK Praha

f11 – Matematické a počítačové modelování

Praha 2006

Souhlasím se zapůjčováním dizertační práce.

Prohlašuji, že jsem dizertační práci vypracoval samostatně
a použil pouze literaturu uvedenou v seznamu.

Děkuji svému školiteli
prof. RNDr. Rudolfu Hrachovi, DrSc.
za odborné vedení práce,
cenné náměty, připomínky a především za čas, který mi věnoval.

Dále děkuji
doc. RNDr. Dušanovi Novotnému, CSc.
za vstřícnost a ochotu, s jakou se mnou danou problematiku též konzultoval.

Obsah

1 Úvod	6
2 Přehled výsledků z literatury	9
2.1 Matematická morfologie	9
2.1.1 Úvod	9
2.1.2 Popis vybraných metod pro morfologickou analýzu vysoké úrovně	10
2.2 Neuronové sítě	17
2.2.1 Úvod	17
2.2.2 Neurofyziologické motivace	18
2.2.3 Biologický neuron	18
2.2.4 Matematický model neuronu	21
2.2.5 Geometrická interpretace funkce neuronu	24
2.2.6 Neuronová síť	28
Základní terminologie	28
Vícevrstvá neuronová síť	29
Učení vícevrstvé neuronové sítě - Backpropagation	30
3 Cíle práce	34
4 Vlastní výsledky	35
4.1 Určování míry uspořádanosti komplexních systémů	35
4.1.1 Úvod	35
4.1.2 Hard-disk model	36

4.1.3	Aplikace neuronové sítě	39
	Úvod	39
	Preprocessing	39
4.1.4	Diskuse	41
	Výsledky	48
4.2	Rekonstrukce degradovaných obrazů zrnitých struktur pomocí neuronových sítí	53
4.2.1	Úvod	53
4.2.2	Modelové struktury	53
4.2.3	Aplikace neuronové sítě	54
	Úvod	54
	Preprocessing	55
4.2.4	Postup řešení	55
	Výsledky	62
5	Závěr	66
	Použitá a doporučená literatura	69

Kapitola 1

Úvod

Zpracování obrazu patří mezi velmi důležité směry počítačové fyziky, neboť obrazová informace je základní (někdy i jediná) v mnoha oblastech fyziky i v dalších oborech vědy a techniky – biologii, medicíně, strojírenství, atd. Pod pojmem zpracování obrazu zde rozumíme určitou posloupnost operací, která se liší v závislosti na řešeném problému. Níže je popsáno nejúplnější možné schema zpracování obrazu či též obrazové analýzy (v rámci anglického názvosloví jsou pro tuto vědní disciplínu ustáleny názvy „Image processing“ či „Image analysis“).

1. Digitalizace
2. Analýza nízké úrovně
 - (a) Geometrické transformace
 - (b) Filtrace
 - (c) Binarizace
 - (d) Rozpoznávání objektů
3. Analýza vysoké úrovně
 - (a) Integrální informace
 - (b) Informace o jednotlivých objektech
 - (c) Informace o rozložení objektů
4. Získávání odborných informací.

Uvedený výčet operací, ze kterých se může obrazová analýza skládat (především bod 4), již dostatečně naznačuje její hlavní význam, který tkví v možnosti získávání nejrůznějších informací o vlastnostech systémů (fyzikálních, biologických atd.) pouze na základě jejich obrazů, tedy bez nutnosti přímých měření (zkoumaných vlastností), která jsou mnohdy dosti obtížně realizovatelná, popř. časově i finančně

náročná. Příslušné obrazy jsou v daném kontextu pořizovány jako fotografie z dalekohledů při sledování astronomických objektů, fotograie z optických mikroskopů v biologii, medicíně, metalurgii nebo fyzice pevných látek, mikrofotografie z transmisních elektronových mikroskopů ve fyzice tenkých vrstev nebo metalurgii, obrazy z STM nebo AFM mikroskopů ve fyzice povrchů, apod.

Obrazová analýza dnes již zahrnuje množství oborů z nichž některé stály u samotného zrodu této disciplíny (matematická morfologie, geometrická pravděpodobnost, atd.), ale také metodiky mladší, které se buď „odštěpily“ od jednoho ze základních stavebních kamenů a dnes již tvoří samostatné specializované obory, nebo to jsou metodiky, které do obrazové analýzy přišly později z jiných vědních oblastí.

Mezi první skupinu patří např. stereologie jež spadá pod obecnější stochastickou geometrii a jejíž vznik je historicky spjat nejvíce právě s geometrickou pravděpodobností. Stereologie je dnes již samostatný obor zkoumající vztah mezi statistickým popisem geometrických vlastností 3D systémů na základě jejich 2D řezů, průmětů či dokonce 1D (lineárních) sond. Stereologie je tedy zároveň jedním z nástrojů obrazové analýzy, který je používán pro statistické vyhodnocení geometrických poměrů 3D systémů a to nejčastěji na základě obrazů několika jejich řezů, či průmětů [1].

Do druhé skupiny patří např. teorie perkolace [2, 3], fraktální analýza, různé transformace (Fourierova, Gáborova, waveletová [4, 5]), ale také teorie neuronových sítí jejichž užitím v analýze obrazu se zabývá tato práce.

Na rozdíl od počítačové grafiky ¹, kde již byly vytvořeny kvalitní komerční programy či soubory programů a uživatel proto potřebuje pouze základní znalosti, v oblasti zpracování obrazu je situace zcela jiná. I zde sice existují společné problémy pro uživatele z nejrůznějších oblastí vědy, a proto pro jejich řešení i zde vznikl kvalitní software na komerční úrovni (to se týká zejména oblasti předzpracování obrazu, např. odstraňování šumu). V dalších krocích se však potřeby různých uživatelů natolik liší, že komerční programové soubory nemohou na všechny tyto požadavky reagovat a uživatel si proto musí specializované programy napsat sám. Z tohoto důvodu patří metodika zpracování obrazu mezi důležité směry počítačové fyziky, který se navíc stále ještě vyvíjí. Tato důležitost je samozřejmě hodnocena různě uživateli z různých oblastí vědy a techniky.

Jak již název napovídá, je tato práce určitou sondou do problematiky využití neuronových sítí v analýze obrazu a to ve dvou konkrétních oblastech. V první části práce (resp. kapitoly 4) je popsána navržená metodika použití neuronových sítí pro určování míry uspořádanosti mnohaobjektových systémů (obrazová analýza vysoké úrovně). V části druhé je pak rozpracována metodika použití neuronových sítí pro rekonstrukci obrazů zrnitých struktur (obrazová analýza nízké úrovně).

Řešení prvního problému bylo inspirováno fyzikou tenkých vrstev, kde jsou mimořádně podstatné informace o rozložení objektů po povrchu, neboť z tohoto rozložení lze usuzovat na fyzikální procesy

¹Počítačová grafika se zabývá grafickou reprezentací resp. zobrazováním dat.

probíhající při nukleaci ² a následném růstu vrstev.

Motivem pro řešení problému druhého pak byl známý fakt, že velikost zrn krystalických látek (např. oceli) přímo určuje jejich mechanické vlastnosti (např. tvrdost), přičemž kvantitativní vztahy mezi velikostí zrn a danou fyzikální veličinou jsou již dnes často dobře popsány [6]. Tudíž ke zkoumání těchto materiálových vlastností může být užito obrazové analýzy, aplikované na mikrofotografie výbrusů či řezů danými materiály. Klasické morfologické metody (Chord-length distribution či rozdělení efektivních průměrů zrn získané z výpočtu jejich ploch), však lze aplikovat pouze na binární obrazy, kde jedna barva je využita pro vykreslení hranic zrn a druhá je barva pozadí. Po binarizaci reálných mikrofotografií však často vznikají obrazy degradované s neúplnými hranicemi a zatížené šumem. Druhá část práce je tedy věnována studiu možnosti použití neuronových sítí pro rekonstrukci takto narušených, zrnitých struktur. Další možností, jak využít neuronové sítě v této problematice, je jejich přímé použití pro analýzu velikostí zrn, a to na základě degradovaných struktur, resp. vhodných charakteristik na tyto struktury aplikovaných (Chord-length distribution, kovariance, fraktální analýza). Tento přístup, který využívá stejné schema, jaké bylo užito k řešení problému určování míry uspořádanosti, však již není součástí této práce a bude předmětem dalšího studia.

²Tento termín označuje počáteční fázi růstu tenkých vrstev při níž jsou vytvářeny zárodky budoucích ostrůvků, jež se následně ve fázi zvané koalescence slévají v jednolitou vrstvu.

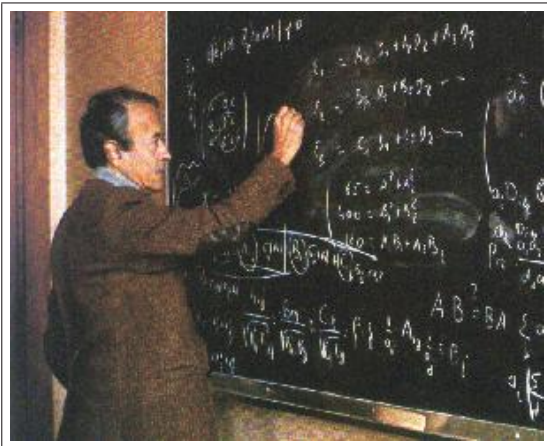
Kapitola 2

Přehled výsledků z literatury

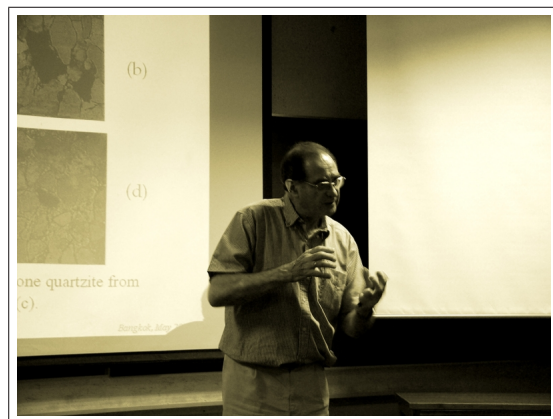
2.1 Matematická morfologie

2.1.1 Úvod

Vznik matematické morfologie [7] je svázán s rokem 1964, kdy byl Georges Matheron (1930-2000) požádán o prozkoumání vztahů mezi geometrií porézního dielektrika a jeho permeabilitou a další zakladatel této disciplíny Jean Serra (*1940) byl pověřen studiem morfologie železné rudy resp. souvislostí mezi uspořádáním/strukturou tohoto materiálu a obsahem Fe či jeho pevností.



G. Matheron



J. Serra

Oba tito pánové tehdy začali budovat dnes již rozvinutou a rozvětvenou disciplínu spadající pod obecnější obrazovou analýzu, kde je využívána jako jeden z mocných nástrojů. Hlavním cílem matematické morfologie je pak především kvantifikace strukturních vlastností různých materiálů či obecnějších systémů (např. i z oblasti biologie, astronomie atd.) a dost často i hledání souvislostí mezi takovýmito morfologickými charakteristikami a jejich fyzikálními či jinými vlastnostmi. Matematická morfologie zahrnuje mj. charakterizaci velikostí a tvarů strukturních prvků daného systému či jejich rozložení.

2.1.2 Popis vybraných metod pro morfologickou analýzu vysoké úrovně

a) Radiální distribuční funkce (RDF)

Radiální distribuční funkce [8] náleží k tzv. bodovým metodám. Jedná se tedy o metodu umožňující charakterizaci rozložení bodových objektů. V případě, že nás zajímá rozložení objektů s nenulovou plochou, lze *RDF* použít k charakterizaci rozmístění těžišť (u symetrických objektů jsou to tedy geometrické středy) těchto objektů. *RDF* vyjadřuje závislost relativní¹ hustoty objektů na vzdálenosti od předem zvoleného (vztažného) objektu, která je navíc průměrovaná a to přes všechny uvažované objekty. Vzorec pro výpočet *RDF* vypadá tedy následovně:

$$P(r) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N P^i(r), \quad (2.1)$$

kde N je počet objektů v pracovní oblasti a

$$P^i(r) = \frac{1}{\varrho_0} \frac{\Delta n_i}{2\pi r \Delta r}, \quad (2.2)$$

přičemž i značí index vztažného objektu², Δn_i je počet objektů v mezikruží o poloměrech r a $r + \Delta r$. Střed tohoto mezikruží splývá s polohou vztažného objektu či obecněji s jeho těžištěm. Zlomek $\frac{\Delta n_i}{2\pi r \Delta r}$ tedy představuje lokální hustotu objektů ve vzdálenosti r od vztažného objektu³, ϱ_0 pak značí hustotu objektů spočítanou z celé pracovní oblasti tzn. $\varrho_0 = \frac{N}{S}$, kde S je plocha pracovní oblasti. *RDF* tedy udává jak se průměrná lokální hustota počítaná ve vzdálenosti r od objektů liší od hustoty střední tzn. spočítané z celé pracovní oblasti. Z *RDF* tak lze např. vyčíst zda se v uspořádání systému vyskytuje nějaká pravidelnost/periodicita, zda systém obsahuje nějaké shluky atd.

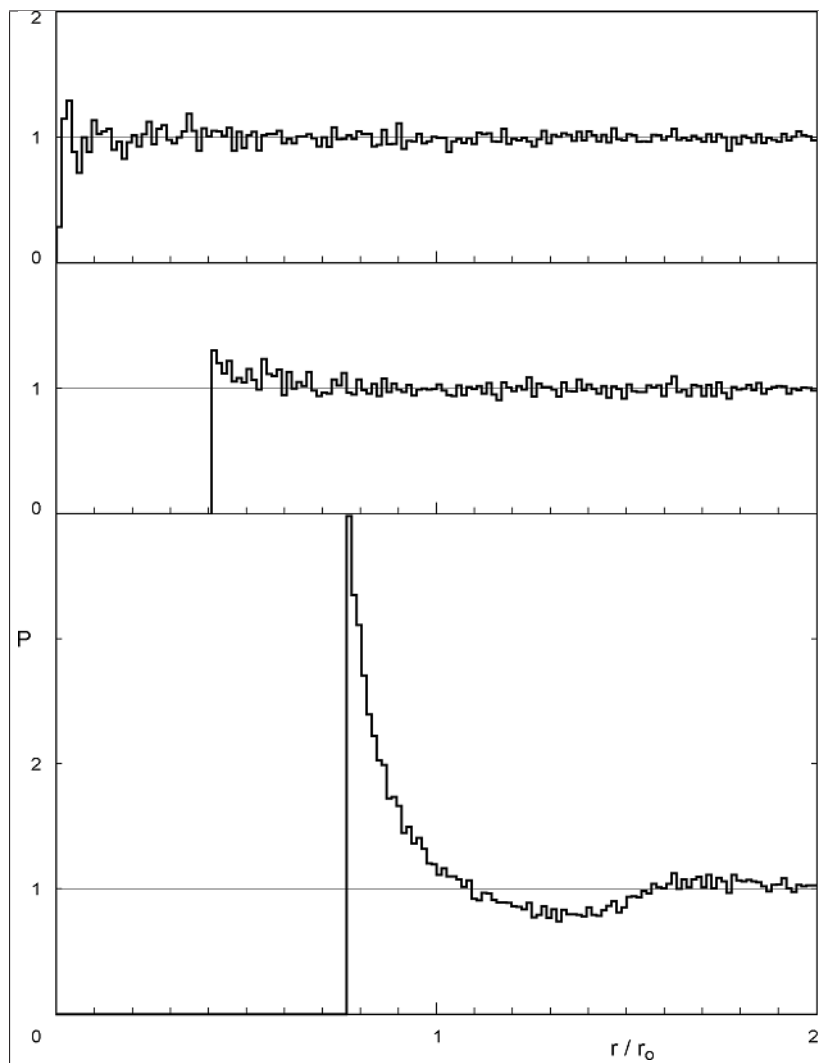
V případě zcela náhodné bodové struktury je *RDF* konstantou (jednička) modifikovanou šumem, zatímco pro částečně uspořádané objekty vznikají na grafu *RDF* oscilace, viz obr. 2.1. Polohy a velikost

¹Hustota spočítaná z mezikruží r až $r + \Delta r$ se dělí střední hustotou ϱ_0 .

²Každý objekt v pracovní oblasti se v průběhu výpočtu *RDF* pro dané r stane právě jednou vztažným objektem.

³Plochu mezikruží lze počítat jako $2\pi r \Delta r$ jen pro $r \gg \Delta r$. Pro malé hodnoty r resp. hodnoty r srovnatelné s Δr je potřeba použít přesný vztah tzn. $2\pi r \Delta r + \Delta r^2$

těchto oscilací, jakož i poloha první nenulové hodnoty RDF , mohou být využity pro charakterizování náhodnosti uspořádání objektů v pracovní oblasti.



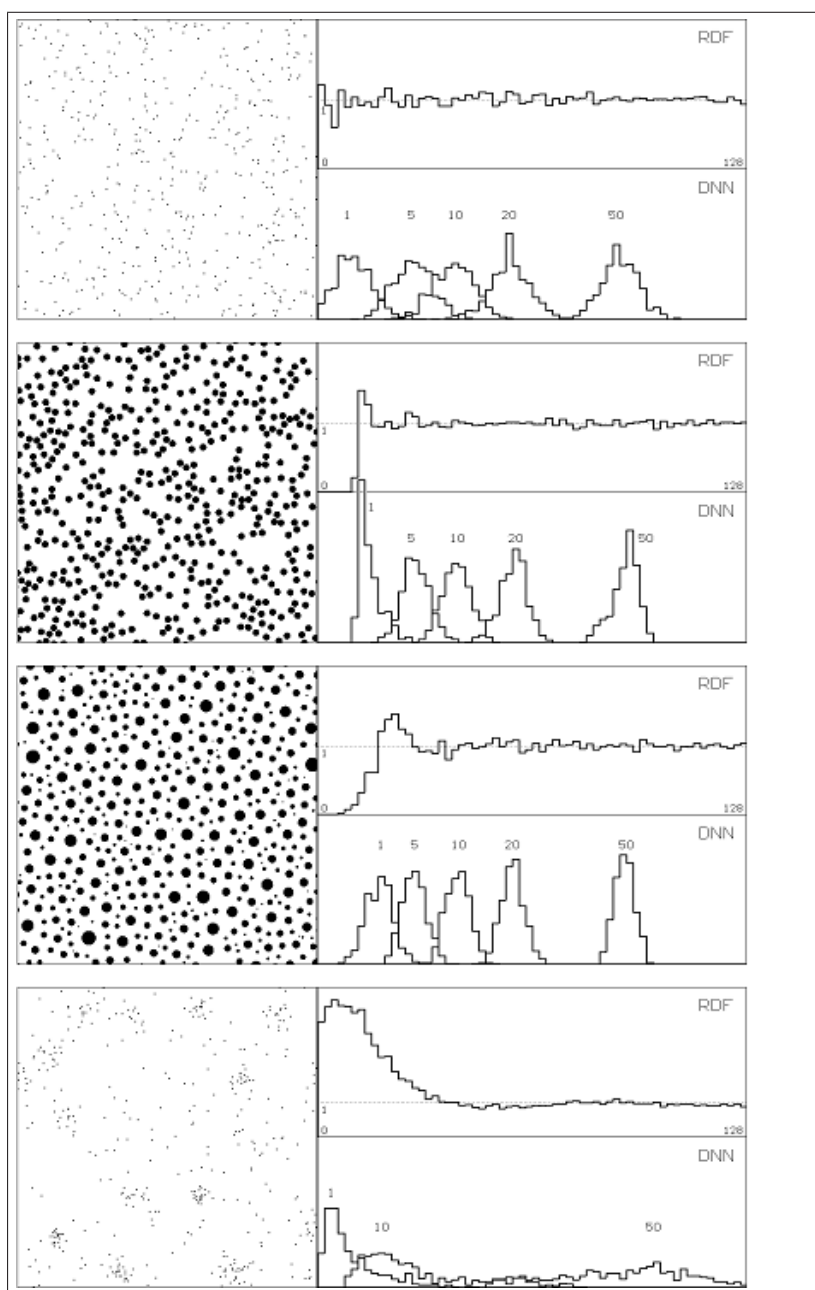
Obrázek 2.1: Radiální distribuční funkce pro tři struktury – zcela náhodnou (nahore), s $DZ_{rel} = 0.3$ (uprostřed) a maximálně uspořádanou ($DZ_{rel} = 1$, dole). r_0 značí mřížkovou konstantu pro uspořádání daného systému v šesterečné soustavě, což je jakýsi limitní stav kterého pomocí hard-disk modelu nelze prakticky dosáhnout ani pro velké DZ . (O difuzní zóně DZ resp. o relativní difuzní zóně DZ_{rel} blíže v kapitole 4.1.2).

At' je uspořádání jakékoli, pro velké hodnoty r by se hodnoty RDF měly blížit číslu 1, neboť s rostoucím r se při konstantním Δr zvětšuje i plocha mezikruží, v rámci něhož tuto hustotu počítáme. Lokální hustota se tedy pro velká r nutně musí blížit hustotě ϱ_0 spočítané z celé prac. oblasti.

Na závěr dodejme, že radiální distribuční funkce se samozřejmě nepoužívá jen k popisu rozložení objektů ve 2D, ale samozřejmě i pro charakterizaci rozložení objektů ve 3D. Mezikruží jsou pak nahrazena kulovými vrstvami a tudíž $2\pi r \Delta r$ přejde na $4\pi r^2 \Delta r$ a ϱ_0 přejde z $\frac{N}{S}$ na $\frac{N}{V}$, kde V je objem pracovní oblasti.

b) Rozdělení nejbližších sousedů (DNN)

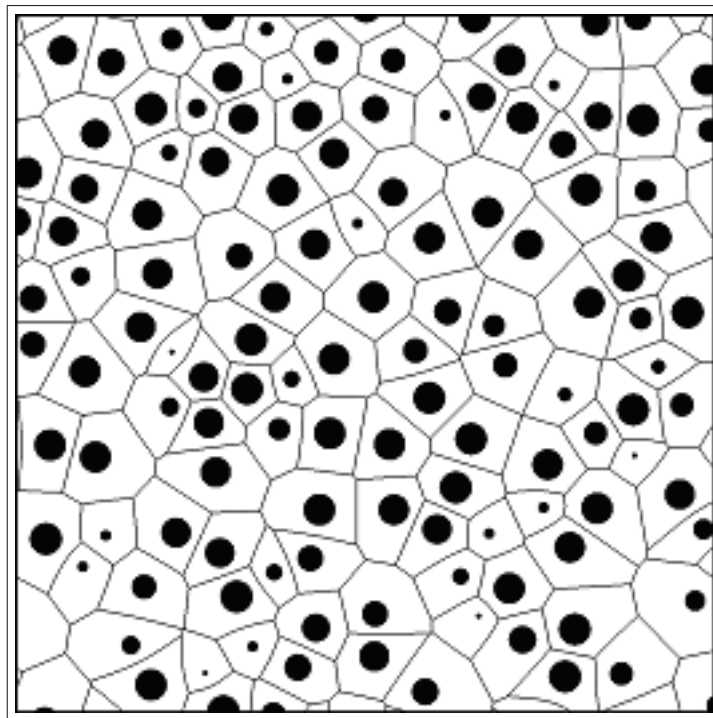
Pod pojmem rozdělení nejbližších sousedů i -tého řádu rozumíme rozdělení vzdáleností ve kterých mají objekty svého i -tého nejbližšího souseda [9]. Jestliže není zmíněn řád, jedná se automaticky rozdělení nejbližších (a to doslovně) sousedů neboli o rozdělení nejbližších sousedů prvního řádu. Chceme-li sestavit toto rozdělení, nalézáme postupně pro každý uvažovaný objekt jeho i -tého nejbližšího souseda přičemž z příslušných vzdáleností sestavíme histogram, jehož j -tý sloupec vyjadřuje relativní četnost s jakou vzdálenost i -tého nejbližšího souseda nabývá hodnoty v rozmezí r_j až $r_j + \Delta r$, kde v případě obvyklého ekvidistantního dělení je $r_j = j\Delta r$. DNN je charakteristika, kterou lze použít jak pro analýzu rozložení bodových objektů, tak i pro analýzu rozložení objektů s nenulovou plochou. V případě nebodových objektů pak existují dvě varianty DNN . V rámci jedné je vzdálenost dvou objektů definována jako vzdálenost jejich těžišť a v rámci druhé jako vzdálenost jejich hranic. Vzdálenost hranic dvou objektů je obvykle definována jako minimum ze vzdáleností $|AB|$, kde A je libovolný hraniční bod prvního objektu a B je libovolný hraniční bod druhého. Subor histogramů vzdáleností nejbližších sousedů prvního, druhého, třetího ... řádu má stejnou vypovídací hodnotu jako RDF , kterou lze z této série histogramů rekonstruovat [10]. Na obrázku 2.2 jsou pro ilustraci zobrazeny RDF a histogramy DNN několika řádů odpovídajících třem různým strukturám.



Obrázek 2.2: Čtyři různé struktury a jejich vyhodnocení pomocí RDF a DNN (řád 1, 5, 10, 20, 50).

c) Wiegnerovy-Seitzovy buňky (WS buňky)

V této metodě se pracovní oblast s objekty rozdělí na tzv. Wiegnerovy-Seitzovy buňky. Vytvořená struktura *WS* buněk se též nazývá Voronoiovo dláždění (*VT*) [11, 12, 13], což velmi přiléhavě vystihuje vizuální podobu struktury *WS* buněk, jež je generována příslušnou množinou objektů. Jedna Wigner-Seitzova buňka příslušející k danému objektu, je množina všech bodů, jejichž vzdálenost od hranice tohoto objektu je menší, než vzdálenost od hranice objektů ostatních. Na obrázku 2.3 je znázorněna modelová struktura kruhových objektů doplněná příslušným Voronoiovým dlážděním.



Obrázek 2.3: Modelová struktura kruhových objektů doplněná příslušným Voronoiovým dlážděním.

Rozdělení úhlů stran, velikostí ploch, tvarových faktorů⁴, atd. jednotlivých buněk *VT* lze využít k charakterizaci rozložení objektů, které dané *VT* generují. V nedávné době byl mj. pomocí rozdělení tvarových faktorů Wigner-Seitzových buněk úspěšně detekován fázový přechod ve 2D modelu vody [14]. V případě bodových systémů či systémů kruhových objektů se stejným poloměrem, se hranice jednotlivých buněk *VT* skládají z úseček. V případě systému kruhových objektů s různými poloměry je obecně hranice každé buňky složena ze zakřivených čar.

⁴Tvarový faktor (*FF*) má za úkol charakterizovat odchylky tvaru daného objektu od kruhu. Zavádíme jej obvykle tak, aby pro kruh nabýval hodnoty jedna a s růstem deformace objektu (odchylky od kruhu) aby jeho hodnota klesala k nule. Této definici vyhovuje vztah: $FF = 4\pi \frac{S}{O^2}$, kde *S* je plocha objektu a *O* jeho obvod.

d) Quadrat Counts (QC)

Tato metoda se od předchozích liší v tom, že shrnuje informaci o rozložení objektů do jediného čísla [15, 16]. Analýza pomocí QC probíhá následovně. Nejprve je v rámci pracovní oblasti náhodně umístován tzv. testovací čtverec a vždy jsou spočítány objekty (bodové objekty či těžiště objektů nebodových) jež padly do tohoto čtverce. Počet objektů ležících ve čtverci tak představuje náhodnou veličinu ξ . Výše zmíněné číslo, charakterizující rozložení objektů je pak definováno následovně:

$$QC = \frac{D(\xi)}{E(\xi)}, \quad (2.3)$$

kde $D(\xi)$ je rozptyl a $E(\xi)$ střední hodnota náhodné veličiny ξ .

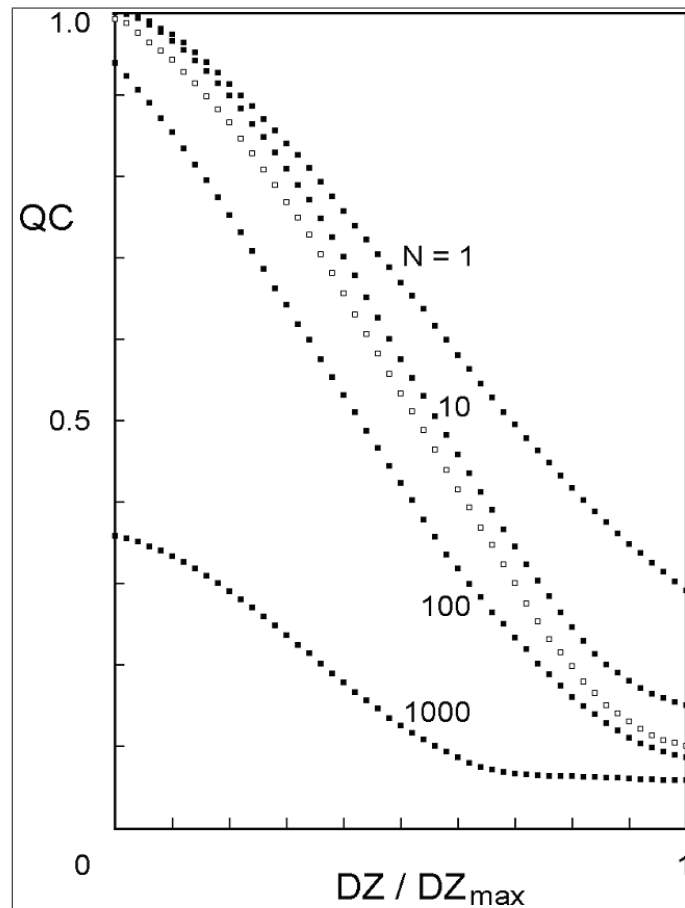
Pro zcela náhodnou⁵ strukturu je $QC = 1$ ⁶. Naopak pro zcela uspořádanou (rovnoměrně) strukturu je $QC = 0$.

Citlivost metody (na změnu náhodnosti uspořádání objektů) je samozřejmě závislá na délce strany testovacího čtverce resp. na středním počtu objektů $N = E(\xi)$ v testovacím čtverci, viz obr. 2.4.

Při analýze stupně uspořádanosti se snažíme najít takovou velikost čtverce při níž bude metoda QC vykazovat stejnou citlivost pro různé úrovně uspořádanosti (zde reprezentované hodnotou DZ resp. $\frac{DZ}{DZ_{max}}$) analyzovaných systémů. Jinými slovy snažíme se volit velikost testovacího čtverce tak, aby byl průběh QC v závislosti na stupni uspořádanosti co možná nejvíce lineární. Na obr. 2.4 je graf QC s optimálním průběhem ($N = 50$) znázorněn prázdnými čtverci.

⁵Objekty jsou bodové a jejich souřadnice jsou generovány náhodně s rovnoměrným rozdělením.

⁶Platí jen v případě velkého počtu objektů v testovacím čtverci, neboť pak má náhodná veličina ξ Poissonovo rozdělení.



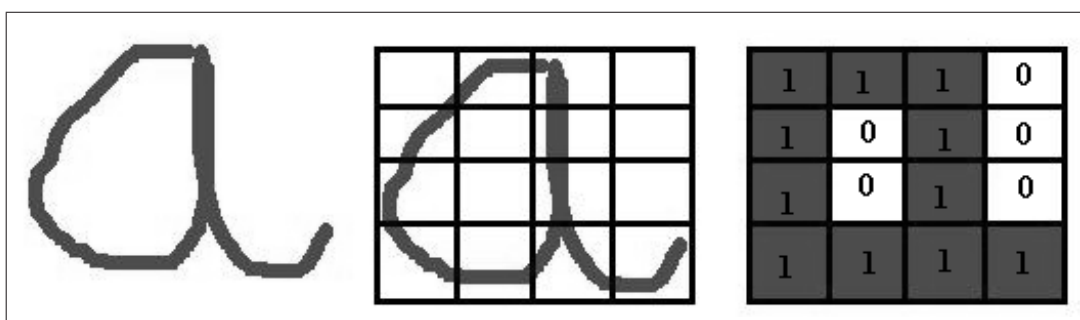
Obrázek 2.4: Kalibrace metody QC pomocí hard-disk modelu s difusní zónou DZ , N zde označuje střední počet objektů v testovacích čtvercích. (O difuzní zóně DZ a o hard-disk modelu blíže v kapitole 4.1.2)

2.2 Neuronové sítě

2.2.1 Úvod

Vznik neuronových sítí byl motivován snahou člověka o vytvoření tzv. umělé inteligence. Počátek tohoto vědního oboru je spojen s prací Warrena McCullocha a Waltera Pittse z roku 1943 „*A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity*“, ve které popsali velmi jednoduchý matematický model základní buňky nervového systému zvané neuron. Dnes je již teorie neuronových sítí velmi propracovaná a díky technickým možnostem dnešní doby i prakticky aplikovatelná.

Neuronové sítě [17] představují v dnešní době skupinu inteligentních technologií pro analýzu dat, jež se liší od ostatních klasických technik především tzv. adaptační fází, ve které se neuronová síť učí z vhodně zvolených tréninkových vzorů, kterými je reprezentován daný problém. Tyto vzory tvoří tzv. tréninkovou množinu. Velmi často se používá tzv. učení s učitelem, které předpokládá že každý tréninkový vzor je tvořen uspořádanou dvojicí (vstup sítě; požadovaný výstup sítě), resp. (otázka; správná odpověď). Vstup i výstup sítě jsou obecně uspořádané n -tice reálných čísel. Pro lepší pochopení uveďme jeden typický příklad použití neuronových sítí (NS) v oblasti rozpoznávání písma. Jestliže budeme chtít naučit NS rozpoznávat např. písmeno „a“, bude tréninková množina složena ze vzorů ve tvaru (písmeno; pravdivostní hodnota). Písmeno bude samozřejmě vhodně upraveno do maticové, resp. vektorové podoby (viz obr. 2.5) a pravdivostní hodnota udává, zda předložené písmeno je „a“, či nikoli. Tato konkrétní síť by tedy měla dimenzi vstupního vektoru 16 a jednodimenzionální výstup. Na digitalizaci ručně psaného písma, by byla vhodnější síť, jejímž vstupem by opět byla maticová reprezentace daného znaku a výstup by měl dimenzi rovnou počtu všech uvažovaných znaků. Výstupní vektor reprezentující písmeno „a“ resp. „b“ by mohl vypadat takto: (1 0 0 0 0 ...) resp. (0 1 0 0 0 ...).



Obrázek 2.5: Úprava písmene „a“ do podoby vhodné pro zpracování neuronovou sítí.

Celá síť se skládá z elementárních výpočetních jednotek nazývaných, stejně jako ve fyziologickém případě, neurony, které jsou v případě nejčastěji používaných dopředných sítí uspořádány do vrstev (viz kapitoly 2.2.4 a 2.2.6). Jak již naznačil uvedený příklad, neuronové sítě se používají pro řešení problémů, u kterých není znám algoritmus řešení, nebo jejich analytický popis je pro počítačové

zpracování příliš komplikovaný. Typicky se neuronové sítě dají použít všude tam, kde jsou k dispozici příkladová data (tréninková množina), která dostatečně pokrývají problémovou oblast. Neuronové sítě jsou dnes standardně používány mj. v následujících oblastech:

- *Rozpoznávání obrazců*
- *Řízení složitých zařízení v dynamicky se měnících podmínkách* (regulace dávkování různých vstupních surovin ve výrobě, autopilot ...).
- *Predikce a případné následné rozhodování* (předpověď počasí, vývoj cen akcií na burze, spotřeba elektrické energie ...).
- *Kompresa dat*
- *Transformace signálů* (převod psaného textu na mluvený ...)
- *Analýza signálů* (EKG ...)
- *Expertní systémy* (určování diagnózy ...)

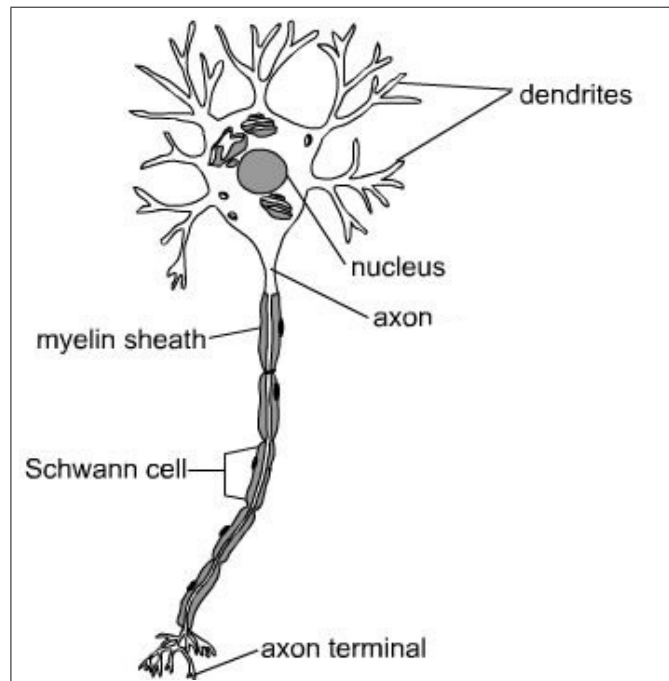
2.2.2 Neurofyziologické motivace

Motivací pro vznik tohoto dnes již propracovaného vědeckého oboru bylo pochopit a modelovat funkce lidského mozku. Nové poznatky z neurofyziologie umožnily vznik zjednodušených matematických modelů neuronů resp. neuronových sítí. Neurofyziologie tak poskytla určitý zdroj inspirací (struktura a funkce neuronu, interakce jednotlivých neuronů v rámci nervové tkáně). Navržené modely neuronových sítí byly pak dále rozvíjeny často již bez ohledu na to, zda modelují lidský mozek. Základním cílem rozvoje neuronových sítí se stala schopnost řešit praktické úlohy z různých oborů lidské činnosti (viz *úvod*), což vedlo ke vzniku rozmanitých typů neuronových sítí.

2.2.3 Biologický neuron

Biologický neuron (viz obr. 2.6) je základním stavebním prvkem nervové soustavy. V mozkové kůře člověka jich je 13 až 15×10^9 , přičemž každý může být spojen s přibližně 5000 dalšími neurony. Hlavní

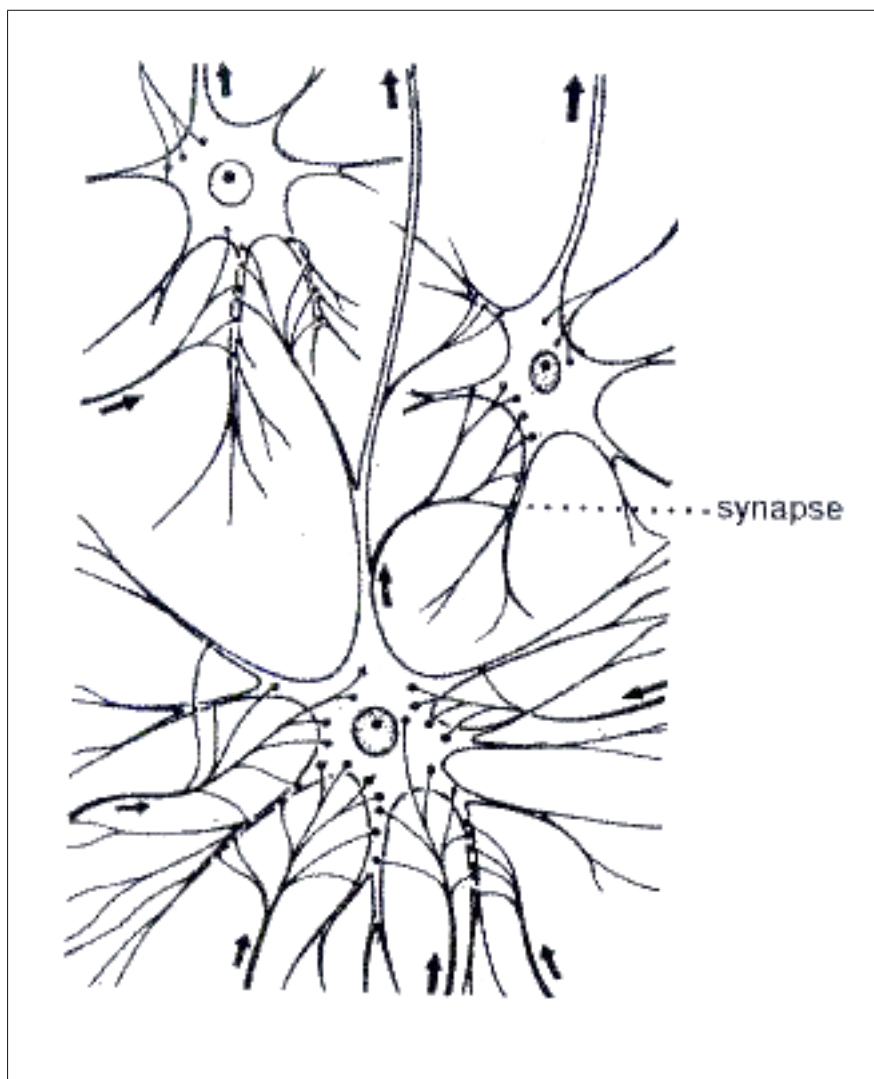
funkcí neuronů je přenos, zpracování a uchování informací nutných pro realizaci životních funkcí organismu. Neuron se skládá z vlastního těla (soma) a přenosových kanálů a to vstupních (*dendrity*) a výstupního (*axon*).



Obrázek 2.6: Schema biologického neuronu.

Axon je zakončen výběžky (*terminály*) jež jsou vesměs napojeny pomocí speciálního rozhraní (*synapse*) na dendrity jiných neuronů (viz obr. 2.7), což umožňuje přenos informace z jednoho neuronu na druhý.

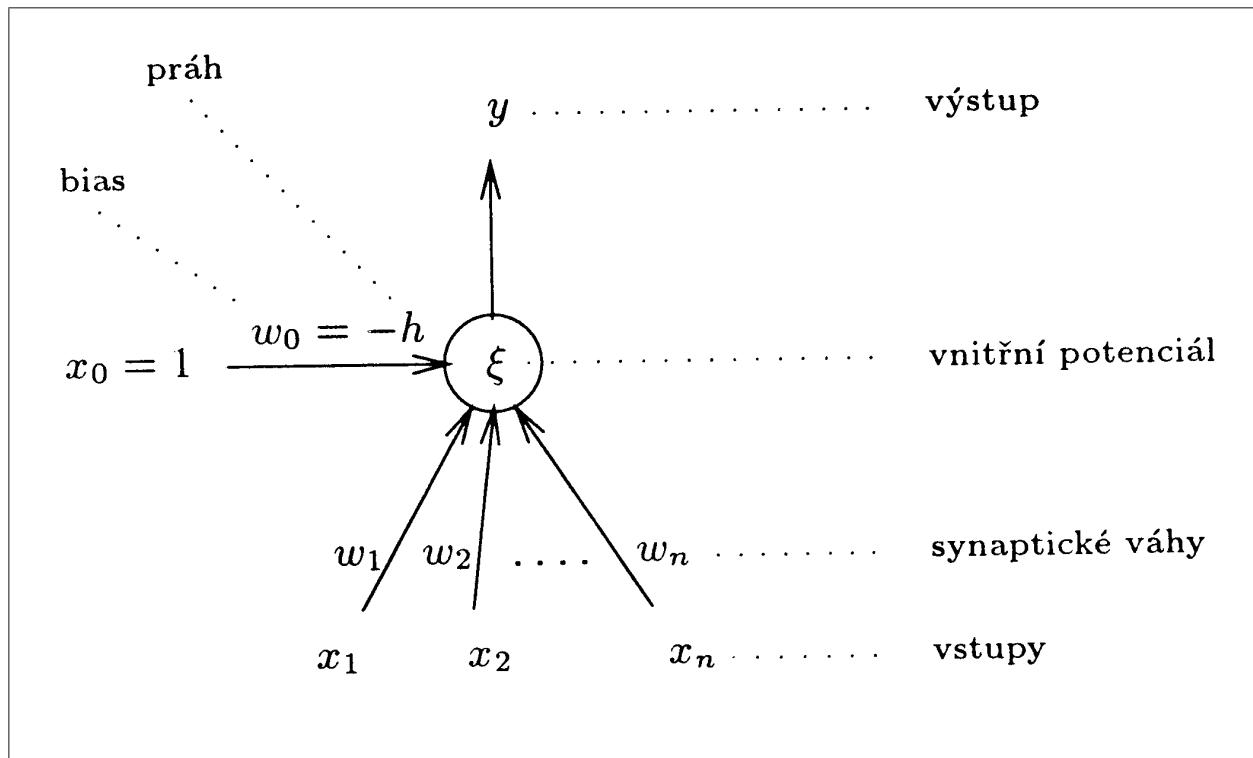
Synapse dělíme na *excitační* a *inhibiční*. Excitační synapse podporují šíření vzruchu nervovou soustavou na rozdíl od synapsí inhibičních, které mají tlumící účinek. Zjednodušené schema šíření informace vypadá následovně. Soma i axon jsou obaleny membránou se schopností generovat elektrické impulsy, které jsou pak přenášeny na dendrity jiných neuronů. Intenzita podráždění dalších neuronů je určena propustností synaptických bran. Podrážděné neurony při dosažení určité hraniční meze, tzv. *prahu*, samy generují impuls a zajišťují tak šíření příslušné informace. Po každém průchodu signálu neuronem se synaptická propustnost mění, což je předpokladem paměťové schopnosti neuronů.



Obrázek 2.7: Schema biologické neuronové sítě.

2.2.4 Matematický model neuronu

Matematický model neuronu, tzv. formální neuron viz obr. 2.8, je základní jednotkou matematického modelu neuronové sítě. Jedná se o přeformulování zjednodušené funkce fyziologického neuronu do matematického jazyka.

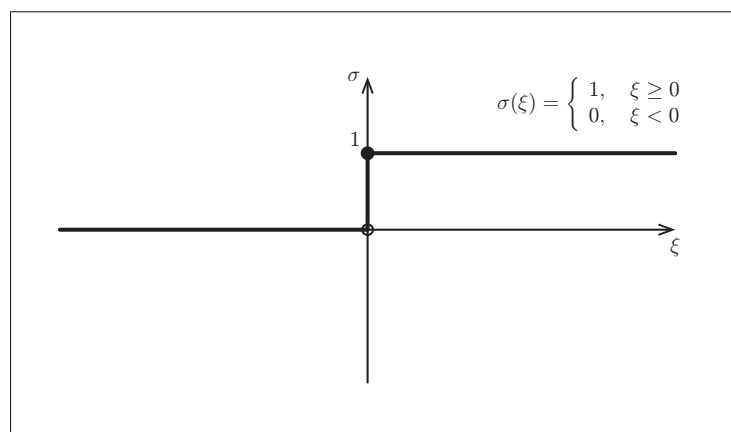


Obrázek 2.8: Schema formálního neuronu.

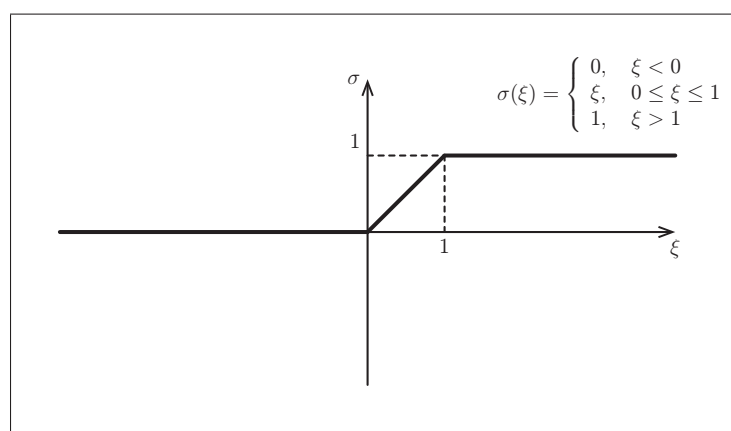
Toto přeformulování je patrné z tabulky 2.1. Každá souřadnice x_i vstupního vektoru daného neuronu je asociována s příslušnou vahou w_i , což je obecně reálné číslo, které se nastaví v průběhu učebního procesu (adaptativní fáze) tak, aby celková chyba naučené sítě vzhledem k dané množině tréninkových vzorů byla minimální. Významově tyto váhy korespondují s funkcí synapsí viz kapitola 2.2.3. Předpokládejme, že dimenze vstupního vektoru \mathbf{x} pro daný neuron je n . Výpočet výstupní hodnoty tohoto neuronu pak probíhá v následujících dvou krocích. V první fázi se spočítá vážená suma $\xi = \sum_{i=0}^n w_i x_i$ tzv. potenciál. Na základě tohoto čísla je pak vypočtena výstupní hodnota y jako $f(\xi)$, kde f je tzv. aktivační nebo též přenosová funkce. Velmi často se jako přenosová funkce používá tzv. sigmoidální funkce, viz obr. 2.11.

Dendrity	n obecně reálných vstupů x_1, x_2, \dots, x_n
Synaptické brány (propustnost)	n obecně reálných váhových koeficientů tzv. vah w_1, w_2, \dots, w_n (Záporné váhy <i>inhibiční</i> a kladné <i>excitační</i>)
Celkové podráždění neuronu (úhrný el. potenciál)	Potenciál neuronu $\xi = \sum_{i=1}^n w_i x_i$ resp. $\xi = \sum_{i=0}^n w_i x_i$ kde $w_0 = -h$ a $x_0 = 1$
Prahová hodnota vzruchu	Práh h
Elektrický impuls axonu indukovaný po dosažení prahové hodnoty vzruchu	Výstup (stav) neuronu $y = \sigma(\xi)$ σ ... aktivační (přenosová) funkce

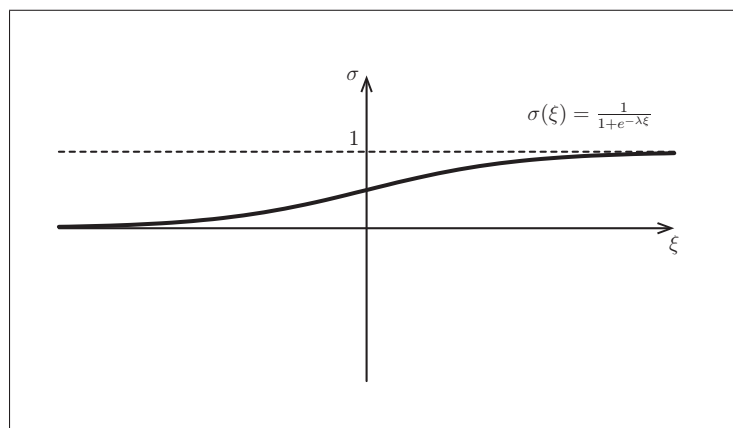
Tabulka 2.1: Porovnání biologického a formálního neuronu.



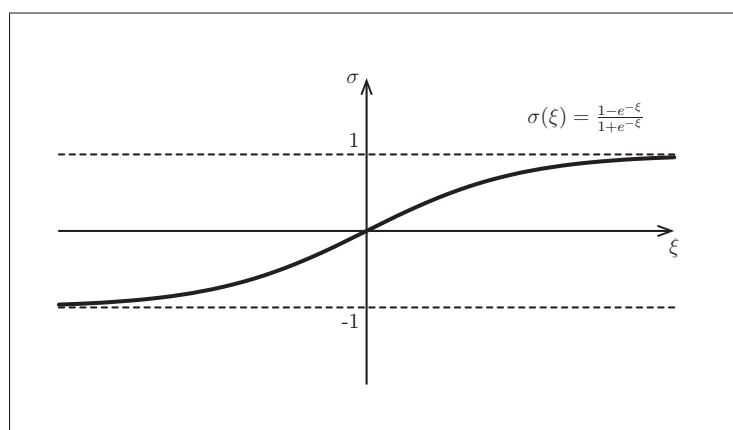
Obrázek 2.9: Ostrá nelinearita.



Obrázek 2.10: Saturovaná lineární funkce.



Obrázek 2.11: Standardní (logistická) sigmoida.

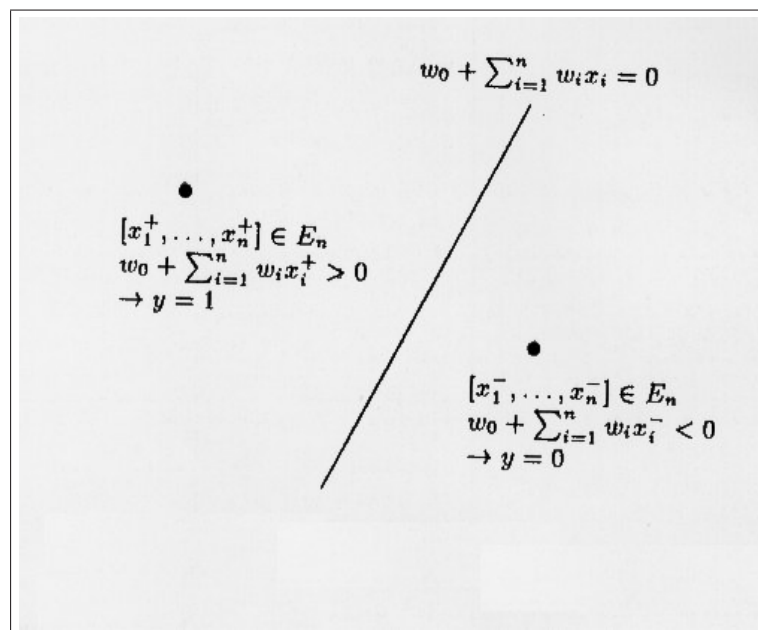


Obrázek 2.12: Hyperbolický tangens.

Jak je patrné z obr. 2.8 a 2.9, přechází se obvykle k nulovému „prahu“. Jelikož porovnávat $\sum_{i=1}^n w_i x_i$ s prahem h je totéž jako porovnávat $\sum_{i=1}^n w_i x_i - h$ s nulou, zavede se formální vstup x_0 , jenž se položí roven jedné. Dále je definována váha w_0 tzv. *bias* takto: $w_0 = -h$. Upravený potenciál, který v případě ostré nelinearity porovnáváme již s nulou vypadá tedy následovně: $\sigma(\xi) = \sum_{i=0}^n w_i x_i$. Význam biasu resp. prahu je popsán v následující podkapitole. U některých typů neuronových sítí (asociativní sítě...) se biasy neuvažují, u jiných je výpočet potenciálu ξ zcela odlišný (RBF sítě...) a interpretace tudíž též poněkud vzdálená od původní biologické motivace. Těmito sítěmi se však v této práci nebudeme zabývat.

2.2.5 Geometrická interpretace funkce neuronu

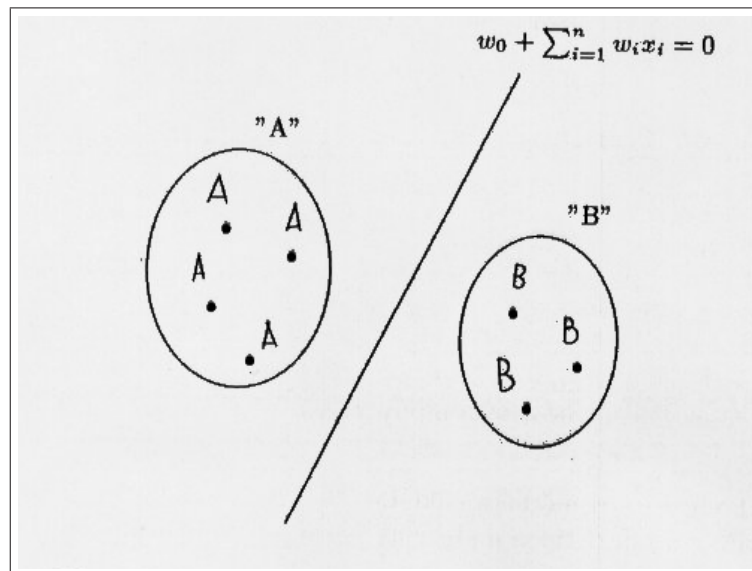
Vstupy neuronu x_1, \dots, x_n (tedy kromě x_0) lze interpretovat jako souřadnice bodu v n rozměrném euklidovském prostoru (tzv. vstupní prostor). Rovnice nadroviny $\xi = 0$ tzn. $\sum_{i=1}^n w_i x_i + w_0 = 0$ (v E_2 přímka, v E_3 rovina ...) rozděluje vstupní prostor na dvě části. Pro všechny body \mathbf{x} z první části platí $\xi(\mathbf{x}) < 0$ a analogicky ve druhém poloprostoru pro každý bod platí $\xi(\mathbf{x}) \geq 0$, viz obr. 2.13.



Obrázek 2.13: Geometrická interpretace funkce neuronu.

Uvažujeme-li jako přenosovou funkci ostrou nelinearitu (viz obr. 2.9), bude první poloprostor neuronem klasifikován hodnotou 0 a druhý číslem 1. Při použití např. logistické sigmoidy (viz obr. 2.11) bude neuron pro body z prvního poloprostoru vracet hodnoty menší než 0,5 a pro body z druhého poloprostoru hodnoty větší než 0,5.

Jeden neuron s vhodně nastavenými váhami (koeficienty dělicí nadroviny) můžeme tedy využít ke klasifikaci objektů, které lze rozdělit do dvou tříd, jež jsou v rámci vstupního prostoru lineárně separabilní, tzn. lze je od sebe odělit nějakou nadrovinou, viz obr. 2.14. Jako přenosovou funkci zde uvažujeme ostrou nelinearitu, viz obr. 2.9.



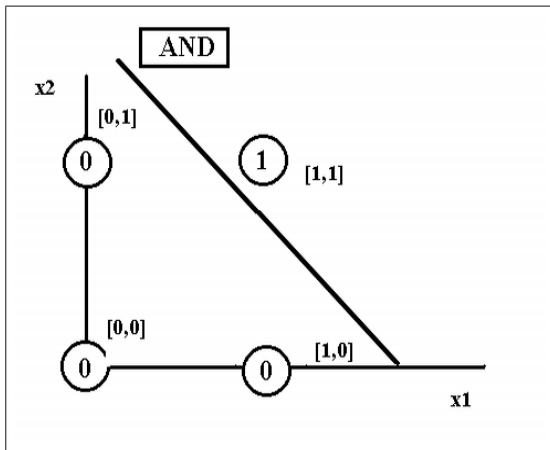
Obrázek 2.14: Separace obrazů „A“, „B“ pomocí neuronu.

Jak je patrné z obrázku 2.15, pomocí jednoho neuronu lze realizovat např. některé jednoduché logické funkce. V našem kontextu se jedná o nalezení příslušné nadroviny oddělující dvě skupiny bodů ve vstupním prostoru $\{[0,0],[0,1],[1,0]\}$ a $\{[1,1]\}$. Z obrázku 2.15 a) je zřejmé, že přímek oddělujících dvě výše uvedené množiny bodů je nekonečně mnoho. Jednou z nich může být např. i přímka $x_1 + x_2 - 2 = 0$. Odpovídající schema formálního neuronu realizujícího funkci AND nad $\{0, 1\}^2$ pomocí této přímky je pak znázorněno na obr. 2.15 b). Jako přenosovou funkci zde samozřejmě uvažujeme ostrou nelinearitu, viz obr. 2.9.

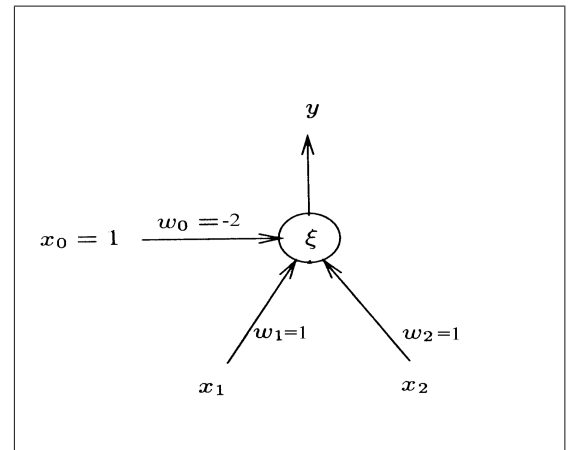
Bohužel ne každá jednoduchá logická funkce je realizovatelná pomocí jednoho neuronu. Učebnicovým příkladem je funkce XOR. Čtenář lehce nahlédne, že příslušné dvě množiny bodů $\{(0,0), (1,1)\}$ a $\{(0,1), (1,0)\}$ klasifikované pomocí této logické funkce v daném pořadí hodnotami 0 a 1 nejsou lineárně separabilní. Jinými slovy neexistuje přímka, kterou bychom tyto dvě množiny od sebe oddělili. V tomto případě je potřeba použít neurony tři uspořádané do dvou vrstev viz obrázky 2.16 a), 2.16 b).

Je zde využito „triku“, že body, které mají být klasifikovány hodnotou 1 jsou výstupním neuronem uzavřeny do průniku (proto AND) dvou poloprostorů, vymezených prvními dvěma neurony a klasifikovaných v obou případech hodnotou 1⁷. Příslušné přímky jsou dále voleny tak, aby zbylé dva body (0,0) a (1,1) do tohoto průniku nenáležely. Body (0,0), (1,1) pak náleží do zbylých dvou průníků příslušných

⁷Klasifikaci daného poloprostoru hodnotou 1, lze vždy zajistit. Nevyhovují-li aktuální koeficienty, dělicí nadroviny, vynásobíme je všichni číslem -1 . Rovnice nadrovin se tím nezmění ovšem „polarita příslušných poloprostorů“ se změní na opačnou.

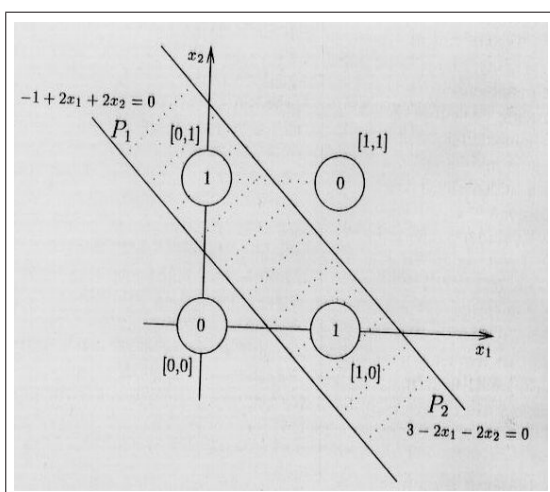


a)

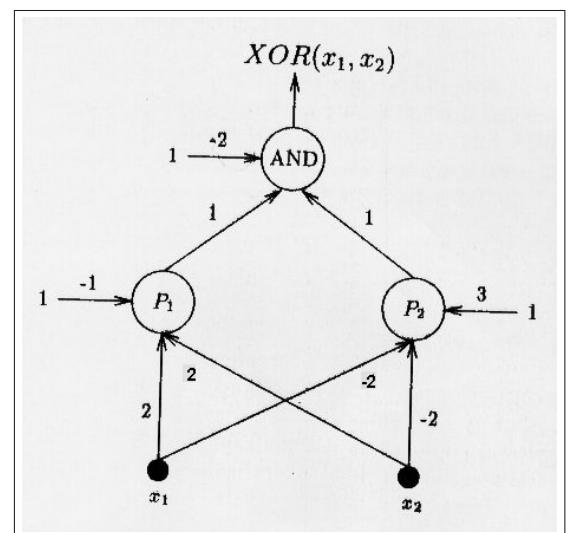


b)

Obrázek 2.15: Realizace logické funkce AND pomocí neuronu.



a)

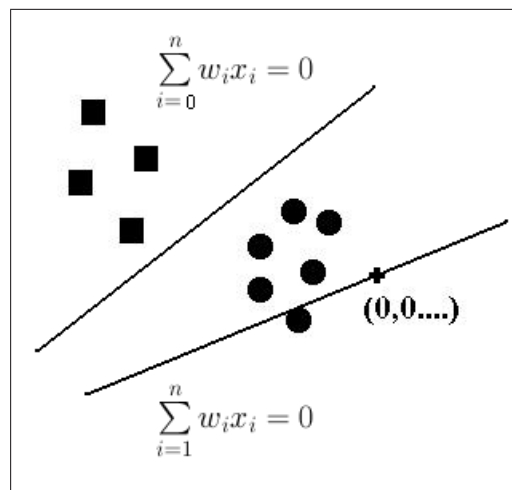


b)

Obrázek 2.16: Realizace logické funkce XOR pomocí 3 neuronů.

poloprostorů ovšem vždy v jednom poloprostoru tvořícím daný průnik je výraz $\sum_{i=0}^n w_i x_i$ pro daný bod záporný a tudíž jej příslušný neuron klasifikuje hodnotou 0.

Význam biasu ($w_0 = -h$) pro rozlišitelnost dvou lineárně separabilních množin bodů ze vstupního prostoru je ilustrován obrázkem 2.17. Z obrázku je patrné, že kdyby bias resp. práh v našem matematickém modelu neuronu chyběl, musela by každá nadrovina, daná váhami neuronu procházet počátkem. Bez tohoto n plus prvního stupně volnosti by tudíž neuron nebyl schopen některé lineárně separabilní množiny bodů oddělit.



Obrázek 2.17: Význam biasu.

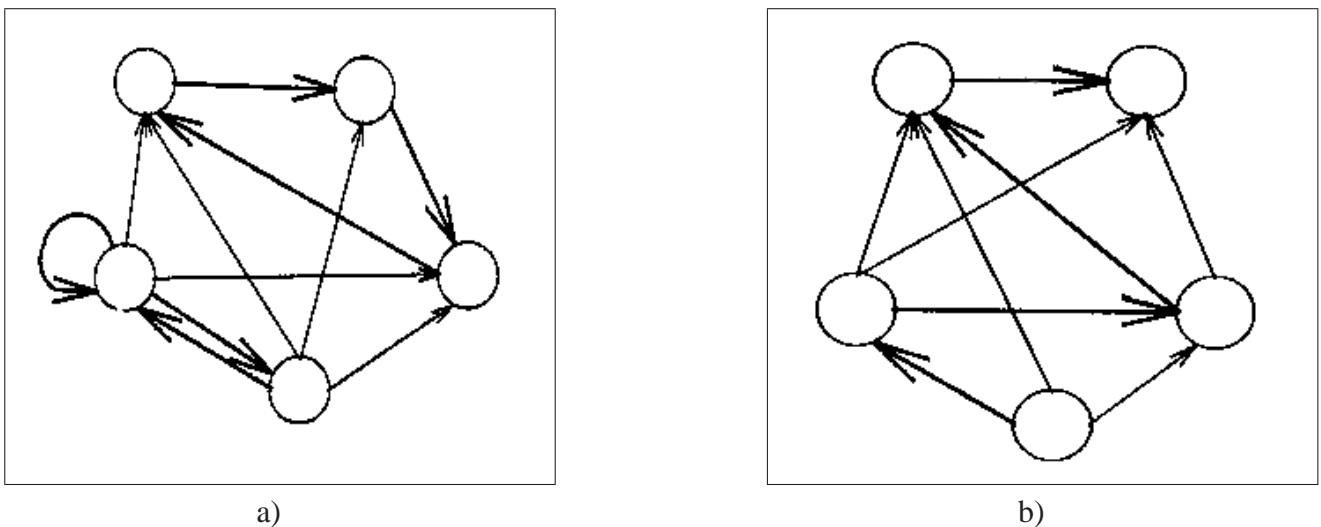
2.2.6 Neuronová síť

Základní terminologie

Systém vzájemně propojených neuronů se nazývá neuronová síť. Propojení je realizováno tak, že výstupní hodnota každého neuronu je přiváděna na vstup neuronů jiných event. i na vstup vlastní (Hopfieldova síť atd.). Například v dopředné vícevrstvé síti (viz obr. 2.19) je výstup každého neuronu v dané vrstvě přiváděn na vstup každého z neuronů vrstvy následující. Počet neuronů a jejich vzájemné propojení určuje tzv. *architekturu* neboli *topologii* sítě. Z tohoto hlediska rozeznáváme dva základní typy neuronových sítí:

- s *cyklickou* архитектурou,
- s *acyklickou* архитектурou.

Síť má cyklickou architekturu, obsahuje-li alespoň jednu smyčku, viz obr. 2.18 a). V opačném případě mluvíme o síti s topologií acyklickou, viz obr. 2.18 b). Takovouto síť lze vždy uspořádat po vrstvách.



Obrázek 2.18: Příklad sítě s cyklickou a) a acyklickou b) strukturou.

Stav neuronové sítě je vektor stavů všech neuronů v síti (tzn. hodnot jejich výstupů). *Konfigurací neuronové sítě* rozumíme vektor všech vah sítě (včetně biasů).

Dynamiku neuronové sítě neboli její vývoj v čase dělíme na *organizační*, *aktivní* a *adaptivní*. Organizační dynamika definuje změny topologie sítě. Aktivní dynamika postihuje změny stavu sítě neboli vlastní výpočet výstupu sítě na základě zadaného vstupu. Adaptivní dynamikou označujeme změny konfigurace sítě (proces učení).

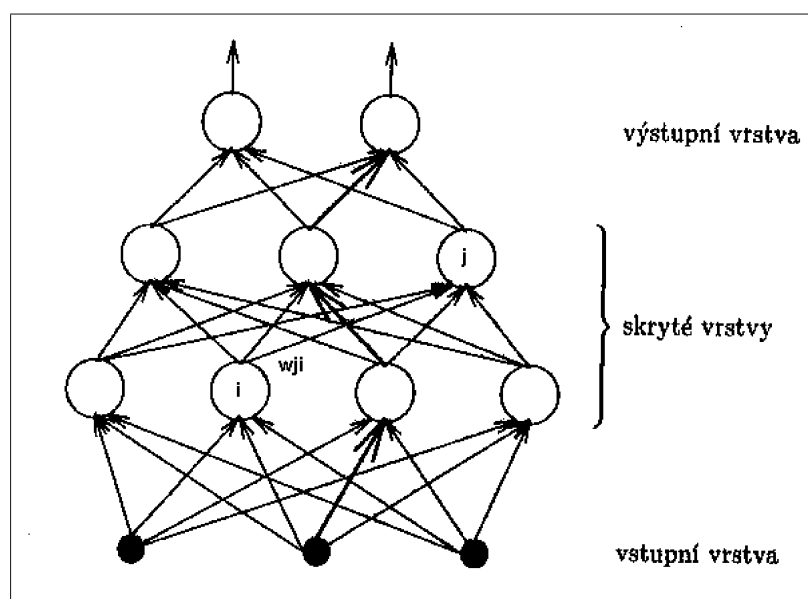
Vícevrstvá neuronová síť

Ve vícevrstvé neuronové síti jsou neurony uspořádány do vrstev. Pojem vícevrstvá neuronová síť se občas upřesňuje na *dopředná* vícevrstvá neuronová síť aby se zdůraznilo, že vylučujeme jakékoli cykly (např. zpětné vazby) v rámci sítě. V dalším textu se budeme zabývat výhradně dopřednou neuronovou sítí a pro stručnější vyjadřování budeme v textu psát pouze vícevrstvá síť.

V tomto typu neuronové sítě je výstup každého z neuronů v dané vrstvě je přiváděn na vstupy všech neuronů ve vrstvě následující, viz obr. 2.19. V této souvislosti mluvíme o takzvaných spojích mezi neurony, což jsou myšlené orientované čáry spojující neurony v dané vrstvě s neurony ve vrstvě následující. Spoj neuronu i v dané vrstvě s neuronem j ve vrstvě následující je asociován s příslušnou vahou w_{ji} viz obr. 2.19. Potenciál neuronu j nevstupní vrstvy (viz dále) se pak spočítá následovně:

$$\xi_j = \sum_{i=0}^n w_{ji} y_i \quad (2.4)$$

kde n je počet neuronů v předcházející vrstvě a y_0 je jedničkový vstup „zvážený“ biasem w_{j0} . Hodnoty y_i pro $i \in \{1, 2, \dots, n\}$ jsou výstupní hodnoty neuronů v předcházející vrstvě.



Obrázek 2.19: Příklad architektury vícevrstvé neuronové sítě.

Neurony dle umístění, resp. funkce, v rámci sítě rozdělujeme na *vstupní*, *pracovní* (skryté, mezilehlé) a *výstupní*. Vstupní neurony slouží pouze k zavedení signálu do sítě. Inicializují se hodnotami jednotlivých složek vstupního vektoru (signálu) a nepodílí se tudíž na výpočtu. Jedná se o analogii k biologickým receptorům. Pracovní neurony slouží k přenosu a transformaci původního signálu, jenž je naposled zpracován neurony výstupními. Výsledek výpočtu neuronové sítě je reprezentován právě vektorem výstupních hodnot výstupních neuronů. Speciálním případem vícevrstvé sítě je síť jednovrstvá jež obsahuje pouze vstupní a výstupní vrstvu. I když se ve skutečnosti skládá ze dvou vrstev, mluvíme

o síti jednovrstvé, vstupní vrstva se v tomto kontextu vypouští a to zřejmě proto, že se nejedná o plnohodnotné neurony, které na základě vstupu vypočítají nějaký výstup, ale jedná se o pouhé kontejnery na vstupní data. Mluvíme-li tedy obecně o m -vrstvé síti, jedná se ve skutečnosti o síť mající vrstev $m + 1$ (vstupní vrstva, $m - 1$ skrytých vrstev a výstupní vrstva). V rámci schématického označení jež udává celkový počet vrstev a počet neuronů v nich se již vstupní vrstva nevynechává takže třívrstvá neuronová síť, jež je znázorněna na obr. 2.19 se dá jednoduše popsat takto: 3–4–3–2 .

Učení vícevrstvé neuronové sítě - Backpropagation

Cílem učení (adaptace) neuronové sítě je nalezení takové konfigurace (takových vah) aby síť realizovala co nejpřesněji předepsanou funkci. Funkce, kterou má síť po skončení adaptace realizovat je zadána ve formě tzv. tréninkové množiny (TRM). Pro učení dopředné vícevrstvé sítě se používá tzv. učení s učitelem což znamená, že tréninková množina je složena z uspořádaných dvojic $(\mathbf{x}_k, \mathbf{d}_k)$, kde $\mathbf{x}_k \in R^n$ je vstup sítě a $\mathbf{d}_k \in R^m$ je její požadovaný výstup přičemž $k \in \{1, 2 \dots p\}$, kde p je počet vzorů. Počet a výběr tréninkových vstupů \mathbf{x}_k má samozřejmě vliv na tvar funkce, kterou bude naučená síť realizovat, podobně jako např. při interpolaci je interpolační funkce ovlivněna výběrem a počtem interpolovaných bodů. Nejčastěji vybíráme tréninkové vstupy \mathbf{x}_k rovnoměrně z celé oblasti, kterou má naučená síť zobrazovat. Během učení se upravují všechny váhy sítě tak, aby celková chyba sítě na tréninkové množině byla minimální. Chyba sítě vzhledem ke vstupu \mathbf{x}_k je definována takto:

$$E_k = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^m (y_j(\mathbf{w}, \mathbf{x}_k) - d_{kj})^2, \quad (2.5)$$

kde $\mathbf{y} \in R^m$ je příslušný výstup sítě.

Chyba sítě vzhledem ke tréninkové množině je pak rovna součtu těchto dílčích chyb.

$$E = \sum_{k=1}^p E_k \quad (2.6)$$

Váhy sítě se po výpočtu této celkové chyby upraví tak, aby její hodnota byla při dalším průchodu tréninkovou množinou menší. Tyto dva kroky (výpočet chyby E , modifikace vah) se opakují tak dlouho, dokud chyba neklesne pod předem určenou mez či pokud se její hodnota mění s časem jen minimálně a je zřejmé, že pod stanovenou mez se nedostaneme vůbec (např. uvíznutí v lokálním minimu) či za daleko větší čas než jsme ochotni adaptaci sítě věnovat.

Základní algoritmus pro učení vícevrstvé sítě se nazývá Backpropagation a je založen na gradientní minimalizaci celkové chyby E . Gradient se vztahuje ke konfiguraci \mathbf{w} (vektoru všech vah) neboť při pevně stanovené tréninkové množině a topologii sítě závisí chyba E pouze na vahách $E = E(\mathbf{w})$.

Základní adaptační vzorec tedy vypadá následovně:

$$\mathbf{w}^{(t)} = \mathbf{w}^{(t-1)} - \varepsilon \frac{\partial E^{(t-1)}}{\partial \mathbf{w}} \quad (2.7)$$

Každá váha, příslušná spoji vedoucímu z i -tého do j -tého neuronu se tedy adaptuje takto:

$$w_{ji}^{(t)} = w_{ji}^{(t-1)} - \varepsilon \frac{\partial E^{(t-1)}}{\partial w_{ji}} \quad (2.8)$$

kde t značí číslo průchodu tréninkovou množinou a $\varepsilon \in (0, 1)$ je tzv. rychlost učení. Odvození vztahů pro parciální derivace $\frac{\partial E}{\partial w_{ji}}$ v různých vrstvách sítě lze provést dvěma způsoby. Jednak lze jít cestou postupného dosazování do vztahu (2.5) za y_j a následně i za ξ_j . Tímto způsobem můžeme E_k vyjádřit ve tvaru, který obsahuje váhy libovolné vrstvy neuronů a automaticky i váhy neuronů ve vrstvách následujících. Odvození závislosti dílčí chybové funkce E_k na vahách neuronů výstupní vrstvy je ukázáno ve (2.9)

$$E_k = \frac{1}{2} \sum_{J=1}^m (y_J - d_{kJ})^2 = \frac{1}{2} \sum_{J=1}^m \left(\frac{1}{1 + e^{-\lambda \xi_J}} - d_{kJ} \right)^2 = \frac{1}{2} \sum_{J=1}^m \left(\frac{1}{1 + e^{-\lambda \sum_{I=0}^n w_{JI} y_I}} - d_{kJ} \right)^2 \quad (2.9)$$

kde y_J jsou výstupy neuronů ve výstupní vrstvě (odpovídající vstupu sítě x_k) a y_I jsou vstupy těchto neuronů (včetně formálního jednotkového vstupu y_0) resp. výstupy neuronů ve vrstvě předchozí. Jako přenosovou funkci jsme použili nejčastěji používanou standardní sigmoidu. Postupným dosazováním za výstupy neuronů v jednotlivých vrstvách bychom nakonec obdrželi funkci, v níž by figurovaly pouze váhy sítě jakožto proměnné, příslušný vstupní vektor x_k a koeficient λ případně koeficienty λ_j . Komplikovanost výsledného vztahu by závisela na počtu vrstev sítě. Výsledný tvar v (2.9) již umožňuje přímý výpočet parciálních derivací chybové funkce E_k podle vah výstupních neuronů

$$\frac{\partial E_k}{\partial w_{ji}} = \left(\frac{1}{1 + e^{-\lambda \sum_{I=0}^n w_{JI} y_I}} - d_{kJ} \right) \frac{-1}{(1 + e^{-\lambda \sum_{I=0}^n w_{JI} y_I})^2} e^{-\lambda \sum_{I=0}^n w_{JI} y_I} (-\lambda) y_i. \quad (2.10)$$

Po zpětném dosazení obdržíme:

$$\frac{\partial E_k}{\partial w_{ji}} = (y_j - d_{kJ}) y_j^2 \frac{(1 - y_j)}{y_j} \lambda y_i = (y_j - d_{kJ}) y_j (1 - y_j) \lambda y_i \quad (2.11)$$

Pro odvození vztahu $\frac{\partial E_k}{\partial w_{ji}}$ v případě, že w_{ji} jsou váhy neuronů ve skryté vrstvě, bychom museli provést ještě jednu úroveň dosazení ve vztahu (2.9) tzn. za y_I , tento vztah opět zderivovat, provést zpětné dosazení a obdržený výsledek (pro předposlední vrstvu) zobecnit. Poněkud méně pracné odvození (bez nutnosti konstrukce vztahu pro E_k v němž by figurovaly příslušné váhy) lze realizovat použitím pravidla o derivaci složené funkce. Zavedme nejprve další značení, jež použijeme při tomto odvozování.

X – množina n vstupních neuronů

Y – množina m výstupních neuronů

$\rightarrow j$ – množina neuronů z nichž vede spoj do neuronu j

$j \rightarrow$ – množina neuronů do nichž vede spoj z neuronu j

Do množiny $\rightarrow j$ je zahrnut i formální neuron s konstantním jednotkovým výstupem tzn. $0 \in \rightarrow j$ jemuž přísluší váha (bias) w_{j0} .

S ohledem na (2.6) můžeme psát:

$$\frac{\partial E}{\partial w_{ji}} = \sum_{k=1}^p \frac{\partial E_k}{\partial w_{ji}}. \quad (2.12)$$

Příslušnou derivaci rozepíšeme za použití pravidla o derivaci složené funkce:

$$\frac{\partial E_k}{\partial w_{ji}} = \frac{\partial E_k}{\partial y_j} \frac{\partial y_j}{\partial \xi_j} \frac{\partial \xi_j}{\partial w_{ji}}. \quad (2.13)$$

Derivováním potenciálu ξ_j viz (2.4) podle váhy w_{ji} obdržíme následující výsledek:

$$\frac{\partial \xi_j}{\partial w_{ji}} = y_i. \quad (2.14)$$

Parciální derivaci $\frac{\partial y_j}{\partial \xi_j}$ získáme derivací přenosové (aktivační) funkce. V našem případě uvažujeme logistickou sigmoidu viz obr. 2.11.

$$\frac{\partial y_j}{\partial \xi_j} = \frac{\lambda e^{-\lambda \xi_j}}{(1 + e^{-\lambda \xi_j})^2} = \lambda y_j^2 e^{-\lambda \xi_j} = \lambda y_j^2 \frac{(1 - y_j)}{y_j} = \lambda y_j (1 - y_j) \quad (2.15)$$

Dosazením (2.15) a (2.14) do (2.13) obdržíme:

$$\frac{\partial E_k}{\partial w_{ji}} = \frac{\partial E_k}{\partial y_j} \lambda y_j (1 - y_j) y_i. \quad (2.16)$$

Pokud je y_j výstupní hodnota výstupního neuronu, tzn. $j \in Y$, lze $\frac{\partial E_k}{\partial y_j}$ s ohledem na (2.5) spočítat přímo:

$$\frac{\partial E_k}{\partial y_j} = y_j - d_{kj}. \quad (2.17)$$

Srovnaj obdržený výsledek ((2.16) + (2.17)) s (2.11).

V případě skrytého neuronu tzn. $j \notin X \cup Y$ použijeme pro výpočet $\frac{\partial E_k}{\partial y_j}$ opět pravidlo pro derivování složené funkce

$$\frac{\partial E_k}{\partial y_j} = \sum_{r \in j \rightarrow} \frac{\partial E_k}{\partial y_r} \frac{\partial y_r}{\partial \xi_r} \frac{\partial \xi_r}{\partial y_j} = \sum_{r \in j \rightarrow} \frac{\partial E_k}{\partial y_r} \lambda y_r (1 - y_r) w_{rj}. \quad (2.18)$$

Právě uvedený vztah v podstatě říká, že změna výstupu j -tého neuronu Δy_j , v dané skryté vrstvě, jež vyvolá příslušnou změnu ΔE_k , vyvolá nejprve změny $\Delta \xi_r$ potenciálů neuronů v následující vrstvě a ty jsou následně příčinou změn Δy_r výstupních hodnot těchto neuronů. Každá změna Δy_r má pak za následek dílčí změnu ΔE_{kr} . Změnu ΔE_k lze tedy vyjádřit pomocí změn Δy_j , $\Delta \xi_r$, Δy_r , ΔE_{kr} .

Výpočty derivací $\frac{\partial E_k}{\partial y_j}$ resp. $\frac{\partial E_k}{\partial w_{ji}}$ se tedy provádí postupně směrem od výstupní vrstvy, kde lze výpočet provést přímo viz ((2.16) + (2.17)), směrem k vrstvě vstupní přičemž při výpočtu derivací v dané skryté vrstvě využíváme již vypočítané hodnoty příslušných derivací ve vrstvě s o jedničku vyšším pořadovým číslem. Proto se tomuto adaptačnímu algoritmu říká metoda zpětného šíření, anglicky backpropagation, neboť při výpočtu derivací nutných ke korekci vah sítě postupujeme obráceným směrem než kterým probíhá výpočet sítě v aktivním režimu.

Toto je tedy základní podoba učebního algoritmu. Jeho slabinou je samozřejmě možnost uvíznutí v lokálním minimu chybové funkce $E(\mathbf{w})$. Tuto nevýhodu lze minimalizovat např. opakovaným spuštěním učebního procesu tzn. z různých počátečních konfigurací \mathbf{w}^0 , které se generují náhodně zpravidla tak aby $w_{ji}^0 \in (0, 1)$. Dále můžeme algoritmus vylepšit vhodnými modifikacemi rychlosti učení ε či dokonce změnami topologie sítě během adaptačního procesu. Jiné alternativy učení neuronových sítí poskytují např. *genetické algoritmy*, *simulované žíhání* atd., se kterými ovšem autor nemá v tomto kontextu zkušenost.

Naučená síť by měla být dostatečně přesná na tréninkové množině, ale zároveň by měla mít požadovanou schopnost zobecnění jinými slovy pro nějaké $\mathbf{x} \notin TRM$ dostatečně blízké nějakému $\mathbf{x}_k \in TRM$, očekáváme hodnotu výstupu \mathbf{y} dostatečně blízkou hodnotě výstupu \mathbf{y}_k . To jakou funkci bude naučená síť na dané oblasti Ω realizovat závisí, kromě výběru tréninkových vstupů $x_k \in \Omega$, i na zvolené topologii sítě tzn. v našem případě na počtu vrstev a počtu neuronů v jednotlivých vrstvách. Jestliže síť bude příliš jednoduchá, nebude k dispozici dostatečný počet parametrů (vah) pro minimalizaci chyby na TRM . Bude-li naopak topologie sítě příliš bohatá, je zde dobrý předpoklad pro dosažení velmi nízké chyby na TRM ovšem zároveň je dosti pravděpodobné, že dojde k tzv. *přeučení* sítě a síť bude špatně zobecňovat. Tento stav je analogický situaci, kdy bychom hledali aproximační funkci (např. pro několik hodnot lineární závislosti) v podobě polynomu s vysokým stupněm. Bohužel není předem známo jaká architektura sítě bude vhodná pro řešení daného problému, takže je třeba na začátku trochu experimentovat. Nejlépe se zřejmě topologie sítě zoptimalizuje tak, že se jí snažíme s ohledem na velikost chyby E modifikovat přímo v rámci učebního procesu, tzn. když se chyba při dané topologii dostatečně nesnižuje, zkusíme přidat jeden či několik neuronů, atd.

Kapitola 3

Cíle práce

Navrzení nových metod zpracování obrazu založených na použití neuronových sítí a to ve dvou konkrétních oblastech:

- 1) pro vyhodnocování stupně uspořádanosti mnohaobjektových systémů,
- 2) a pro rekonstrukci obrazů zrnitých struktur.

Kapitola 4

Vlastní výsledky

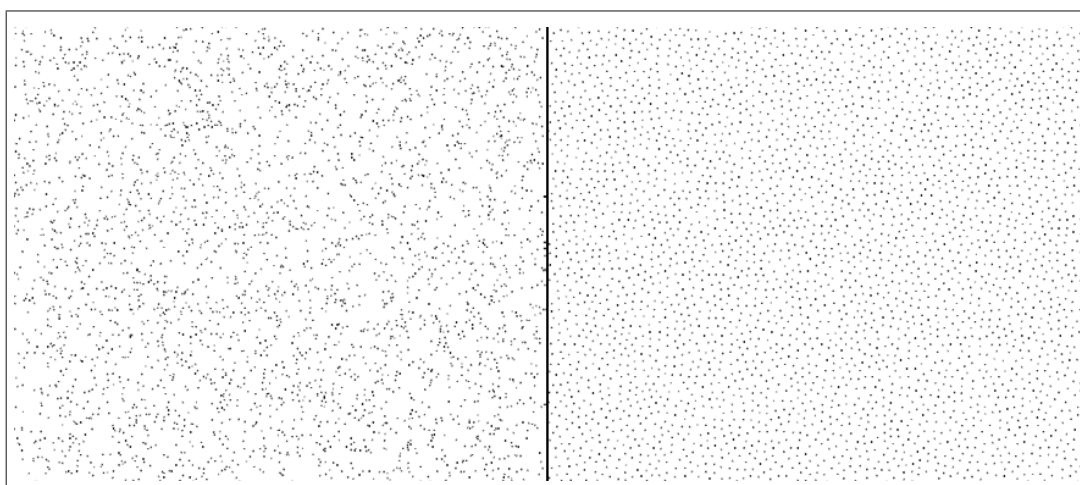
4.1 Určování míry uspořádanosti komplexních systémů

4.1.1 Úvod

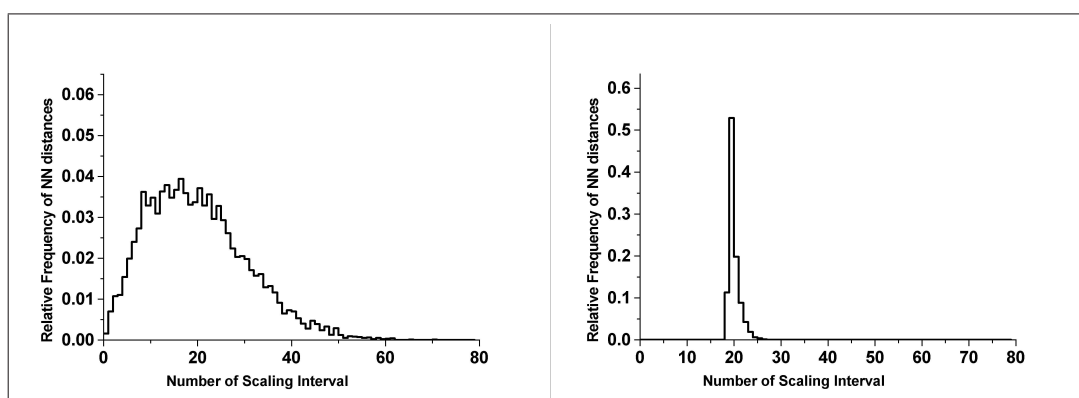
V mnoha vědních oborech, např. v astronomii, metalurgii, fyzice tenkých vrstev, biologii, atd., jsou často studovány systémy sestávající z mnoha objektů. Cílem obrazové analýzy takovýchto systémů je především poskytnutí informace o rozdělení velikostí objektů a o jejich prostorovém rozložení, případně informace o jejich tvaru. Prostřednictvím těchto charakteristik pak můžeme studovat vliv různých činitelů (např. fyzikálních) na daný systém. Neuronová síť představuje nový nástroj, který umožňuje získat informace skryté v morfologických charakteristikách.

K obrazové analýze struktur skládajících se z mnoha objektů se standardně používají různé morfologické charakteristiky (rozdělení nejbližších sousedů – DNN , radiální distribuční funkce – RDF , rozdělení ploch, popř. tvarových faktorů Wiener-Seitzových buněk – W_S, W_{FF} , Quadrat-Count - QC , atd. Kromě metody QC můžeme každou z uvedených charakteristik znázornit grafem, ze kterého však lze jen zřídka kdy určit přímo všechny parametry analyzovaného systému, které nás zajímají. V tomto ohledu je zřejmě informačně nejpřínosnější kovariance $C(\mathbf{h})$, jež udává závislost normalizované plochy překrytí (průniku) původní struktury s jejím posunutým obrazem, na velikosti posunutí h . Z grafu této funkce se dá přímo určit míra pokrytí obrázku objekty dané struktury, střední velikost objektů ve směru kolmém na posunutí \mathbf{h} . Je-li struktura ve směru posunutí \mathbf{h} periodická, je samozřejmě periodická i její kovariance přičemž její perioda udává též periodu struktury v daném směru (tj. rozměr opakujícího se úseku struktury ve směru \mathbf{h}). Obecně lze říci, že změním-li nějaký strukturní parametr, změní se i tvar příslušné morfologické charakteristiky. Parametr, který jsme použili k ovlivňování uspořádanosti modelových struktur jsme nazvali relativní difuzní zóna DZ_{rel} . Tento parametr vyjadřuje minimální vzdálenost ve které lze generovat dva body daného systému, vztaženou k maximu této minimální vzdálenosti pro daný počet bodů a velikost pracovní plochy (viz následující kapitola). Vliv tohoto

parametru na uspořádanost systému je dobře patrný z obrázku 4.1. Na obrázku 4.2 je pak zřejmé jak se tento parametr promítl do tvaru vhodně normovaného rozdělení vzdáleností nejbližších sousedů.



Obrázek 4.1: Dvě struktury se dvěma tisíci body rozloženými v pracovní oblasti 500×500 jednotek (vlevo $DZ_{rel} = 0$ resp. $DZ = 0$, vpravo $DZ_{rel} = 1$ resp. $DZ = DZ_{max}$).



Obrázek 4.2: Vhodně normované grafy rozdělení nejbližších sousedů pro 10000 objektů (vlevo $DZ_{rel} = 0$, vpravo $DZ_{rel} = 1$).

4.1.2 Hard-disk model

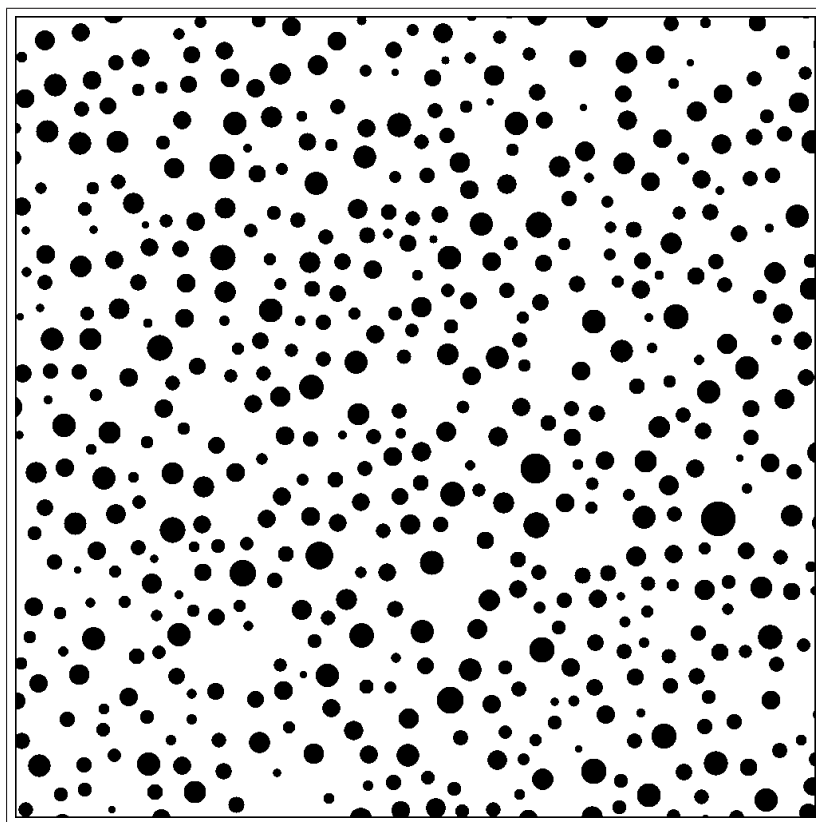
Hard-disk model je zřejmě nejjednodušší model, který lze použít k modelování ostrůvkových struktur znázorňujících např. povrch tenké vrstvy v určité fázi vývoje. Tento model je zadán pracovní oblastí, pravděpodobnostním rozdělením poloměrů kruhových objektů, jež jsou do pracovní oblasti generovány a též minimální vzdáleností (difuzní zónou DZ) ve které se dva nagerované objekty mohou nacházet¹. Též je předem znám počet objektů, které mají být do oblasti nagerovány. Příklad ostrůvkové struktury

¹Jedná se o vzdálenost hranic objektů.

vytvořené tímto způsobem je znázorněn na obrázku 4.3. Generování objektů do vznikající struktury probíhá v následujících krocích:

- 1) *Vygenerování poloměru dle daného pravděpodobnostního rozdělení.*
- 2) *Navržení souřadnic středu přidávaného objektu.²*
- 3) *Ověření, zda objekt umístěný do navrženého místa, je od ostatních objektů vzdálen alespoň o DZ .*

Dvojice kroků 2), 3) je opakována tak dlouho, dokud se nepodaří objekt umístit, případně dokud nevyčerpáme předem stanovený maximální počet pokusů.



Obrázek 4.3: Příklad Hard-disk modelové struktury.

Pro testování neuronových sítí k určování stupně uspořádanosti mnohaobjektových systémů, byl použit bodový hard-disk model, tzn. všechny objekty daného systému měly nulový poloměr, viz obr. 4.1. Jestliže je u tohoto speciálního modelu pevně stanovena velikost pracovní oblasti a počet objektů (bodů), jež hodláme do oblasti nagenarovat, je míra uspořádanosti pouze funkcí minimální povolené vzdálenosti, tzn. difuzní zóny. Z obrázku 4.1 je dobře patrné, že s rostoucí DZ roste i uspořádanost

²Souřadnice přidávaného objektu jsou generovány jako hodnoty náhodné veličiny rovnoměrně rozdělené na daném intervalu hodnot.

systému. Při nulové DZ je systém dokonale náhodný, při dosažení maximální difuzní zóny DZ_{max}^T ³ vykazuje systém v rámci daného modelu maximální uspořádanost. Definice maximální difuzní zóny je poněkud problematická (alespoň pro konečnou pracovní oblast). Můžeme ji teoreticky definovat tak, že pro $DZ > DZ_{max}^T$ už se nám nepodaří předem stanovený počet bodů do dané oblasti nagenarovat resp. dosáhnout předem dané hustoty systému $\rho = \frac{\text{celkový počet bodů}}{\text{obsah plochy pracovní oblasti}}$. Naopak pro libovolnou $DZ < DZ_{max}^T$ se požadovaný počet objektů nagenarovat podaří. Určitá problematičnost definice DZ_{max}^T plyne ze stochastického základu modelu. Výše definovaná DZ_{max}^T závisí sice na hustě systému ρ , avšak nejedná se přímo o funkci této hustoty. Jinými slovy, když bychom několikrát realizovali počítačový experiment pro její zjištění a to při stejné hustotě ρ dospěli bychom (na konečné pracovní oblasti) pokaždé k poněkud odlišné hodnotě. Z tohoto pohledu je tedy DZ_{max}^T při dané hustotě náhodná veličina, jejíž rozptyl se snižuje s rostoucím ρ . V našem případě jsme definovali $DZ_{max}(\rho)$ jako odhad střední hodnoty z DZ_{max}^T při hustotě ρ . Odhad proto, že tato střední hodnota byla při dané hustotě spočítána jako aritmetický průměr několika odhadů DZ_{max}^T . Tyto odhady byly výsledkem počítačových experimentů, kdy byly generovány příslušné bodové systémy při postupně se zvětšující difuzní zóně DZ . Odhad jedné konkrétní hodnoty náhodné veličiny DZ_{max}^T při dané hustotě ρ pak byl určen, jako poslední (největší) DZ , při které byl nagenarován celý systém a to tak, aby k umístění každého bodu v rámci tohoto systému bylo potřeba maximálně N_{max} pokusů. Je evidentní, že i $DZ_{max}(\rho)$ je náhodná veličina, jelikož se jedná pouze o *odhad* střední hodnoty, ovšem jistě se znatelně nižším rozptylem než má DZ_{max}^T , resp. její prakticky zjišťované odhady. Míra uspořádanosti definovaná dle níže uvedeného vztahu pomocí $DZ_{max}(\rho)$ je tedy reprezentativnější než kdyby byla při dané hustotě definována pomocí jedné hodnoty náhodné veličiny DZ_{max}^T ⁴. To, že $DZ_{max}(\rho)$ uvažujeme už i formou zápisu jako funkci hustoty ρ tedy znamená, že rozptyl této ve skutečnosti náhodné veličiny zanedbáváme. Oprávněnost tohoto zanedbání samozřejmě roste s počtem odhadů DZ_{max}^T , které použijeme při dané hustotě k výpočtu $DZ_{max}(\rho)$, s rostoucím N_{max} a samozřejmě se zvětšující se hustotou. Podstatné je, že realizací jedné hodnoty $DZ_{max}(\rho)$ jsme získali jakýsi rozumný odhad horní hranice difuzní zóny při dané hustotě. Rozsah difuzní zóny, v rámci něhož byly následně generovány bodové systémy použité pro učení a analýzu neuronovou sítí, byl tak zúžen na interval $\langle 0, DZ_{max}(\rho) \rangle$. Míra uspořádanosti pak byla definována jako tzv. relativní difuzní zóna $DZ_{rel} = \frac{DZ}{DZ_{max}}$, nabývající hodnot 0 až 1. Dva systémy s hustotami ρ_1 a ρ_2 mají tedy dle naší definice stejnou hodnotu uspořádanosti, jestliže byly vytvořeny při stejné relativní difuzní zóně DZ_{rel} . Rozumnost této definice byla potvrzena i dobrou korespondencí různých morfologických (vhodně normovaných) charakteristik sestavených pro systémy s různými hustotami avšak stejnou hodnotou DZ_{rel} . Nutno ještě zdůraznit, že difuzní zóna je parametr modelu, který samozřejmě koreluje s minimální hodnotou vzdálenosti mezi objekty vytvořeného systému, ovšem tato naměřená minimální vzdálenost je vždy větší nebo rovna difuzní zóně.

³Horní index T označuje, že se jedná o teoretickou resp. přesnou hodnotu.

⁴Mimo jiné i proto, že v případě použití odhadu jedné hodnoty DZ_{max}^T , by mohlo být problematické vůbec nagenarovat bodový systém s $DZ_{rel} \doteq 1$.

4.1.3 Aplikace neuronové sítě

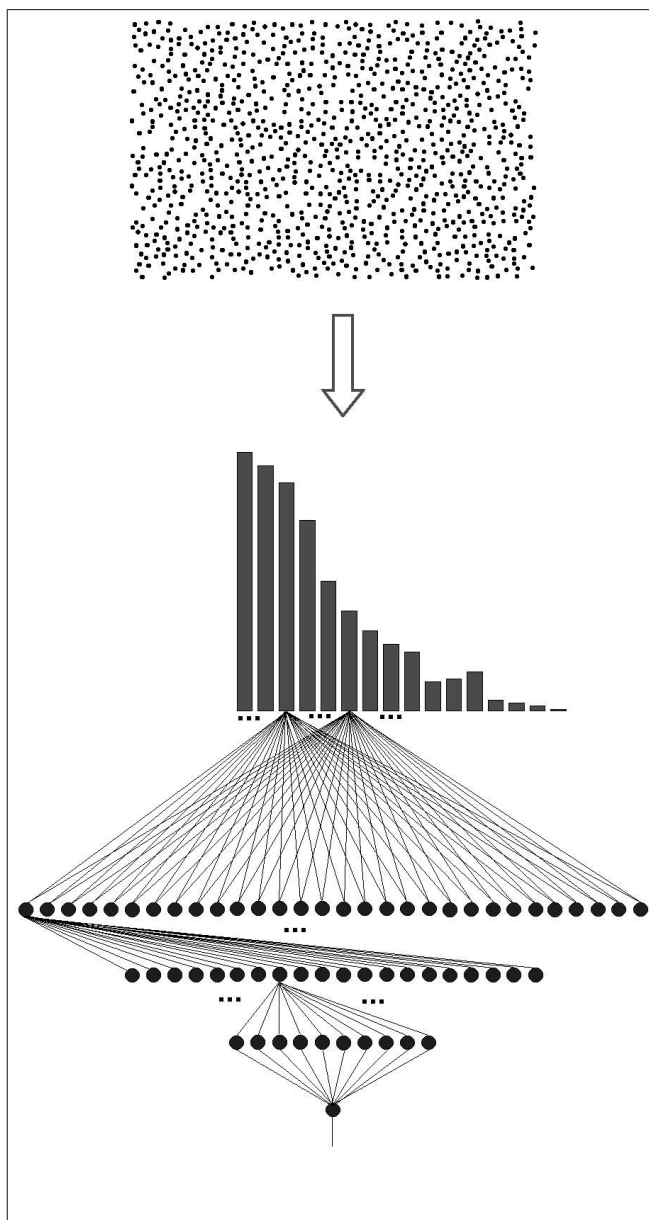
Úvod

Jak již bylo uvedeno v kapitole 4.1.1, mnohaobjektové systémy resp. jejich obrazy se studují pomocí různých morfologických charakteristik (DNN , RDF , atd.), které odrážejí vlastnosti těchto systémů a potažmo i podmínky, za kterých daný (modelový či experimentálně vytvořený) systém vznikl. Jako ilustrativní fyzikální příklad můžeme vzít systém napařených atomů či již ostrůvkovou strukturu (raná fáze vzniku tenké vrstvy), kdy např. teplota, rychlost napařování, tlak, atd. ovlivní míru uspořádanosti daného systému. V tomto případě se samozřejmě podmínky vzniku daného systému promítnou nejen do morfologických charakteristik, ale současně i do fyzikálních vlastností daného systému. Neuronovou síť lze pak dokonce použít jako jakýsi převodník mezi podmínkami vzniku daného systému a jeho fyzikálními vlastnostmi. V našem případě, tzn. bez přímé vazby na experiment, jsme se spokojili pouze s testováním schopnosti neuronové sítě určit výše definovanou míru uspořádanosti modelových struktur (bodový Hard-disk model). Jedná se tedy o použití neuronové sítě jakožto převodníku mezi obrazem bodové struktury a hodnotou daného charakterizačního parametru (relativní difuzní zóna).

Preprocessing

Preprocessing (předzpracování) je většinou nezbytná část řešení problému pomocí neuronové sítě. Cílem preprocessingu je především minimalizace dimenze vstupního prostoru (prostoru vstupů neuronové sítě). Tato minimalizace však nesmí být na úkor ztráty informací, jež nás zajímají resp. jež má vracet neuronová síť. Preprocessing je též často prováděn s cílem zlepšit zobecňovací vlastnosti neuronové sítě. Dá se pomocí něj např. zajistit invariantnost upravených vstupů vůči různým transformacím aplikovaných na vsupy původní (nepředzpracované). V našem případě jsou zpracovávány obrazy bodových struktur a to z hlediska jejich uspořádanosti, tudíž je jistě žádoucí jejich úprava s cílem redukovat původní neúnosně velikou dimenzi vstupního prostoru (např. v případě bitmapy 500×500 pixelů je to 250000) a zajistit invariantnost upravených vstupů vůči některým prostorovým transformacím. Taktéž je zřejmé, že by při pevně dané relativní difuzní zóně upravené vstupy neměly záviset na hustotě zdrojových struktur. Jinými slovy upravené vstupy by se měly v ideálním případě měnit jen se změnou DZ_{rel} , nikoli s hustotou. Tento požadavek je důležitý pro dosažení co nejlepších učebních i zobecňovacích (generalizačních) vlastností neuronové sítě jejímž úkolem je právě určit k danému vstupu míru jeho uspořádanosti, tj. DZ_{rel} . Právě transformace vyšetřovaných struktur do podoby vybraných morfologických charakteristik (DNN , RDF , atd., viz kapitola 4.1.1), navíc vhodně normovaných (za účelem minimalizace vlivu hustoty vyšetřované struktury na finální tvar použité charakteristiky), nám posloužila jako vhodný preprocessing. Celý postup analýzy bodové struktury je zobrazen na obrázku 4.4.

Bodová struktura je nejprve přetransformována do podoby vhodně upravené morfologické charakte-



Obrázek 4.4: Schema analýzy bodové struktury.

ristiky (na obrázku 4.4 se jedná o DNN), jež pak slouží jako vstup pro neuronovou síť. Na obrázku je vyobrazena čtyřvrstvá síť se třiceti, dvaceti a deseti neurony ve skrytých vrstvách a s jedním (síť vrací jediný údaj DZ_{rel}) neuronem ve vrstvě výstupní. Přesnost s jakou je neuronová síť schopna určit DZ_{rel} je samozřejmě závislá mj. i na jemnosti dělení rozsahu veličiny, jejíž rozdělení daná charakteristika představuje. V případě DNN se jako optimální ukázala jemnost dělení přibližně 80, tzn. rozdělení rozsahu na ose x na 80 intervalů. Vliv jemnosti dělení dané charakteristiky, jež zároveň udává dimenzi vstupu neuronové sítě, ale i architektury neuronové sítě popř. zvolené morfologické charakteristiky na přesnost analýzy, je podrobně diskutována v kapitole 4.1.4.

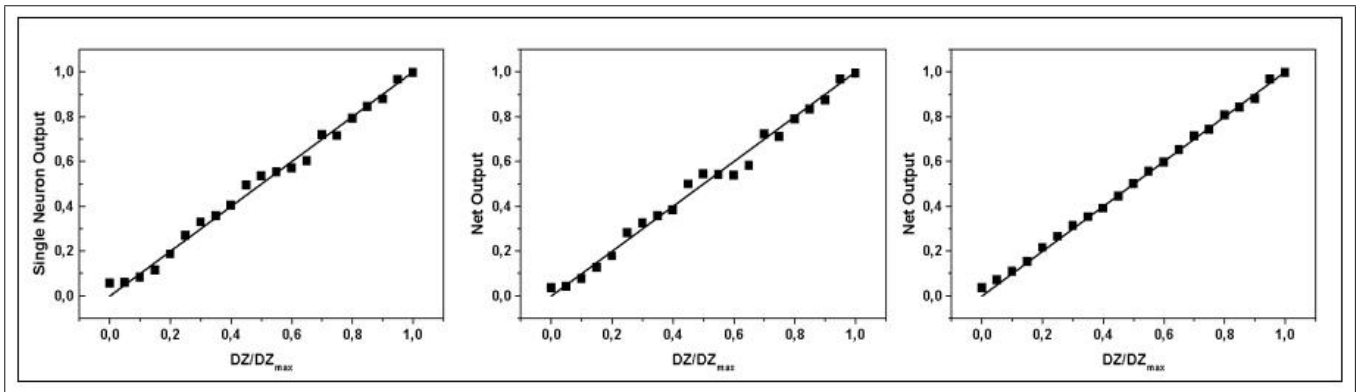
4.1.4 Diskuse

V rámci řešení analýzy uspořádanosti bodových struktur jsme se zabývali vlivem tří základních parametrů nastíněné metodiky.

- a) Architektura NS tzn. počet vrstev a počet neuronů v jednotlivých vrstvách NS .
- b) Typ použité morfologické charakteristiky.
- c) Jemnost vzorkování této charakteristiky.

ad. a)

Architektura neuronové sítě značně ovlivňuje kvalitu řešení daného problému. Příliš mohutná NS s mnoha vrstvami a mnoha neurony v rámci těchto vrstev má sklon k tzv. přeučení, tj. velmi přesně se naučí vzory z tréninkové množiny, ale špatně zobecňuje (tato vlastnost se testuje pomocí vzorů z tzv. testovací množiny). Od dobře naučené NS očekáváme, že předložíme-li jí postupně dva blízké vstupní vektory ze vstupního prostoru, což je obecně nějaká podmnožina R^n , obdržíme dva podobné výstupy a to bez ohledu na to, zda některý ze vstupů byl obsažen v tréninkové množině či nikoli. U přeučené sítě nemusí být tento přirozený požadavek uspokojivě splněn. Přeučená síť řeší náš problém stejně špatně jako polynom vysokého stupně aproximuje jinak např. lineární závislost zadanou souborem hodnot. Také časové nároky na učení mohutné sítě jsou pochopitelně vyšší než v případě sítě jednodušší. Bude-li NS naopak moc jednoduchá, nebudou zde problémy s generalizací, ale s příliš velkou chybou jak na tréninkové, tak na testovací množině. Určit optimální nebo alespoň uspokojivou architekturu NS k danému problému není jednoduché a pouhý popis řešené problematiky často nestačí. K určení vyhovující architektury NS se tudíž často používá heuristických postupů, které začínají od jednoduché, resp. mohutné, architektury, jež je následně s ohledem na uspokojivost dosažených výsledků obohacována, resp. redukována a to buďto automaticky v rámci adaptační fáze (učení) sítě, a nebo naopak samotným uživatelem, v případě pevné topologie v rámci učebního procesu. Po testech několika architektur se jako postačující pro řešení našeho problému ukázala čtyřvrstvá NS X -30-20-10-1, viz obr. 4.4, 4.5, kde X je počet vstupních neuronů neboli dimenze vstupního prostoru. Optimální hodnota tohoto parametru je pro DNN preprocessing diskutována níže a činí přibližně 80.



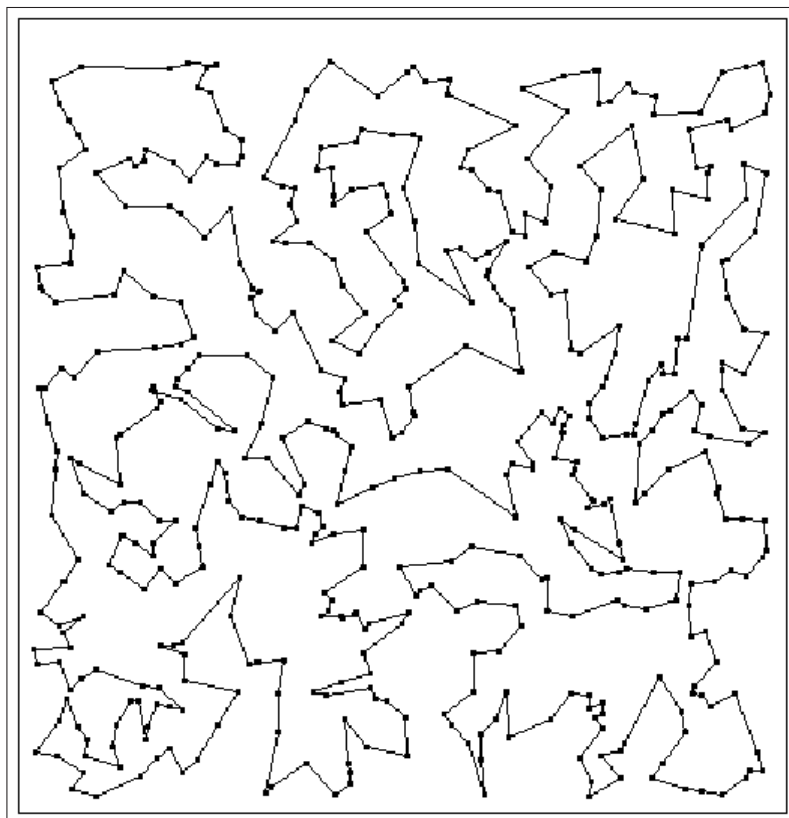
Obrázek 4.5: Korespondence mezi reálnými hodnotami DZ_{rel} (osa x) a výstupy vrácenými neuronovou sítí (osa y) v případě *HDED* preprocessingu (viz následující strana) pro tři různé architektury neuronové sítě na testovací množině struktur. Zleva výsledky sítě 100-1, 100-10-1, 100-30-20-10-1, kde první číslo (100) označuje dimenzi vstupu a dále následují počty neuronů v jednotlivých vrstvách.

ad. b)

V rámci výzkumu byly porovnávány následující morfologické charakteristiky, které lze aplikovat na bodové struktury: rozdělení nejbližších sousedů (*DNN*), radiální distribuční funkce (*RDF*), rozdělení ploch (W_S), obvodů (W_P), tvarových faktorů (W_{FF}) Wiener-Seitzových buněk, *HDED*, kde *HDED* je histogram rozdělení vzdáleností mezi sousedy na extrémně krátké křivce, kterou lze bodovým systémem proložit (viz obr. 4.6).

HDED představuje naši originální morfologickou charakteristiku, kterou lze na rozdíl od *DNN* použít i k charakterizaci klastrové struktury. Až na *RDF* se vždy jedná o rozdělení relativních četností nějaké charakteristické veličiny, např. u *DNN* nás zajímá rozdělení relativních četností vzdáleností nejbližších sousedů, atd. Jemností dělení (vzorkování) rozumíme počet intervalů, do kterých rozdělíme maximální rozsah veličiny o jejíž rozdělení se jedná. Porovnávání morfologických metod (kromě *RDF*) bylo realizováno při jemnosti dělení 50 a 80. Výsledky tohoto porovnání jsou prezentovány v podobě grafu 4.7 resp. tabulky 4.1.⁵

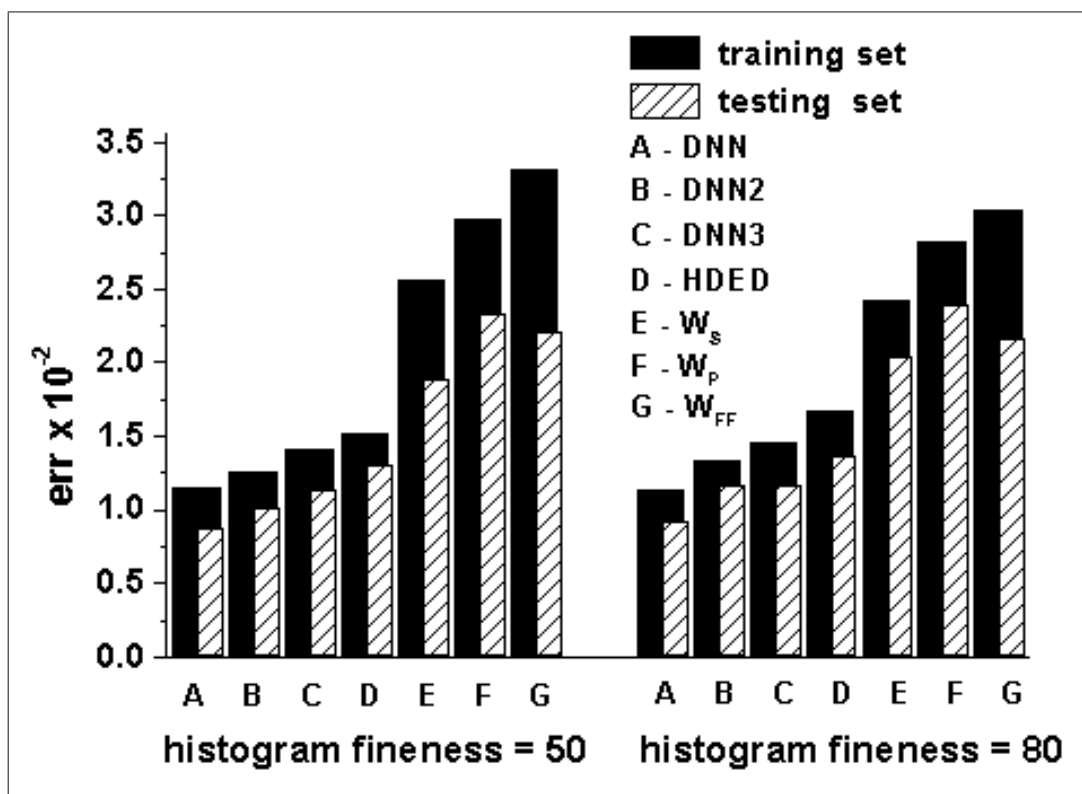
⁵Z důvodu porovnatelnosti přesnosti sítě na tréninkové i testovací množině je chyba přepočtena na jeden tréninkový resp. testovací vzor tzn. $err = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=0}^N y_i - d_i}$, kde N je počet vzorů v tréninkové resp. testovací množině. Střední hodnota čtverce rozdílu mezi výstupem sítě y_i a požadovaným výstupem d_i je navíc odmocněna pro lepší porovnatelnost s požadovanými hodnotami DZ_{rel} .



Obrázek 4.6: Extrémně krátká křivka, proložená bodovou strukturou.

$\text{unit} = 0.01$	Jemnost histogramů = 50					Jemnost histogramů = 80				
	HDED	DNN	W_P	W_S	W_{FF}	HDED	DNN	W_P	W_S	W_{FF}
E_{tr}	1,525	1,158	2,971	2,572	3,313	1,668	1,131	2,829	2,433	3,033
E_{test}	1,308	0,874	2,330	1,889	2,207	1,372	0,919	2,393	2,045	2,164

Tabulka 4.1: Tabulkové porovnání několika morfologických metod z hlediska vhodnosti jejich použití jako preprocessingu vhodného k analýze uspořádanosti bodových struktur pomocí NS .



Obrázek 4.7: Grafické porovnání několika morfologických metod z hlediska vhodnosti jejich použití jako preprocessingu vhodného k analýze uspořádanosti bodových struktur pomocí NS .

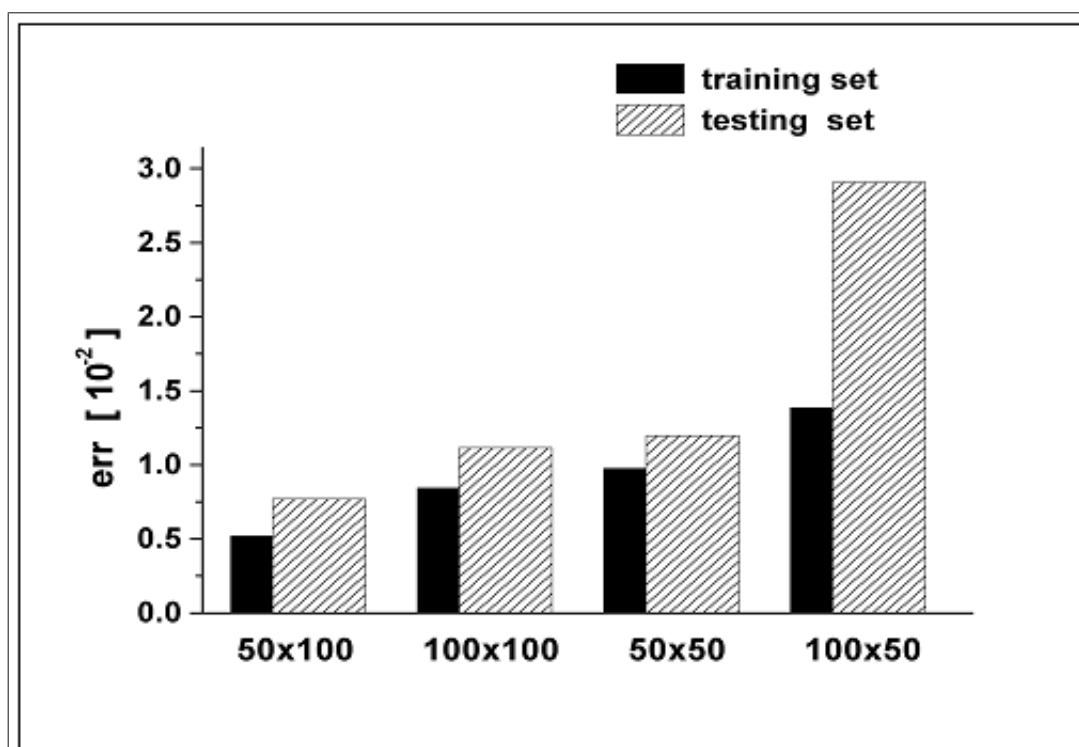
Míra vhodnosti dané metody je dána velikostí střední kvadratické chyby neuronové sítě E_{tr} , resp. E_{test} , na tréninkové, resp. testovací, množině. Tréninková množina se v našem případě skládala z uspořádaných dvojic (histogram; DZ_{rel}), přičemž jednotlivé histogramy byly počítány z bodových struktur čítajících 1000 a 10000 bodů generovaných do pracovní oblasti 500×500 jednotek. Krokování parametru DZ_{rel} při každé z těchto hustot bylo 0,02. Při každé uspořádané dvojici (ρ, DZ_{rel}) , kde ρ značí hustotu bodové struktury, byly vygenerovány 3 struktury a sestrojeny příslušné histogramy a to z toho důvodu, že daná struktura a ani příslušný histogram nejsou právě uvedenou dvojicí vstupních parametrů našeho bodového hard-disk modelu jednoznačně určeny, což je způsobeno částečně náhodným způsobem generování struktury (viz výše). Tréninková množina tedy čítala $2 \times 3 \times 51 = 306$ tréninkových vzorů. Testovací množina byla složena ze 101 uspořádaných dvojic (histogram; DZ_{rel}), při počtu objektů 5500 a kroku DZ_{rel} 0,01. Učení sítě bylo definováno 150 000 iteračními cykly s rychlostí učení $\varepsilon = 0,03$ a 20000 cykly s $\varepsilon = 0,003$.

Z tabulky 4.1 je patrné, že při obou jemnostech byly nejlepší výsledky dosaženy pro *DNN*. To, že je proti očekávání ve všech případech chyba dosažená na testovací množině (E_{test}) nižší než chyba na množině tréninkové (E_{tr}), je způsobeno tím, že součástí tréninkové množiny jsou histogramy získané při počtu 1000 objektů, kdy je samozřejmě větší variabilita příslušné morfologické charakteristiky při pevně dané DZ_{rel} než v případě počtu 5500 objektů. Jinými slovy, kdyby testovací množina byla konstruována při počtu objektů 1000, byla by situace v souladu s naším očekáváním ($E_{tr} < E_{test}$).

Radiální distribuční funkce vzniká poněkud jiným způsobem. Pro dané r udává střední hodnotu relativní hustoty pro mezikruží o vnitřním poloměru r a vnějším poloměru $r + \Delta r$, přičemž střed tohoto mezikruží je postupně ztotožňován s jednotlivými body naší struktury. Velikost Δr je dána maximálním poloměrem r_{max} mezikruží a jemností dělení tohoto parametru, tj. počtu mezikruží. Jestliže chceme porovnávat *RDF* pouze z hlediska parametru DZ_{rel} , je žádoucí eliminovat vliv hustoty tím, že zajistíme, aby se střední počet bodů v i -tém mezikruží co nejméně měnil se změnou hustoty struktury. To znamená, že uvažují-li libovolné dvě struktury, pak plochy mezikruží se stejným indexem musí být v převráceném poměru, než ve kterém jsou hustoty daných struktur. Z právě řečeného plyne, že parametr r_{max} si mohou zvolit pouze u jedné hustoty (z praktických důvodů je vhodné zvolit jako vztažnou nejmenší hustotu). Dále je zřejmé, že ekvidistantní dělení tohoto parametru pak mohou zajistit právě pouze u vztažné hustoty. Vliv parametru r_{max} a počtu mezikruží na chybu neuronové sítě je naznačen v grafu 4.8, resp. tabulce 4.2.

Z tabulky je patrné, že *RDF* je při vhodně zvolených parametrech velmi vhodná pro předzpracování struktury z hlediska detekce DZ_{rel} neuronovou sítí. Varianta (50×100) je zřetelně lepší než *DNN* při obou zvolených jemnostech a dodejme, že pro *DNN* je jemnost dělení 80 téměř optimální, viz dále. Povšimněme si též, že zde platí ($E_{tr} < E_{test}$) což znamená, že tato charakteristika je obecně méně variabilní pro různé struktury generované za týchž parametrů (ρ, DZ_{rel}) . Nevýhodou *RDF* je její poměrně velká časová náročnost pro struktury s mnoha body (5000 a více).

ad. c)

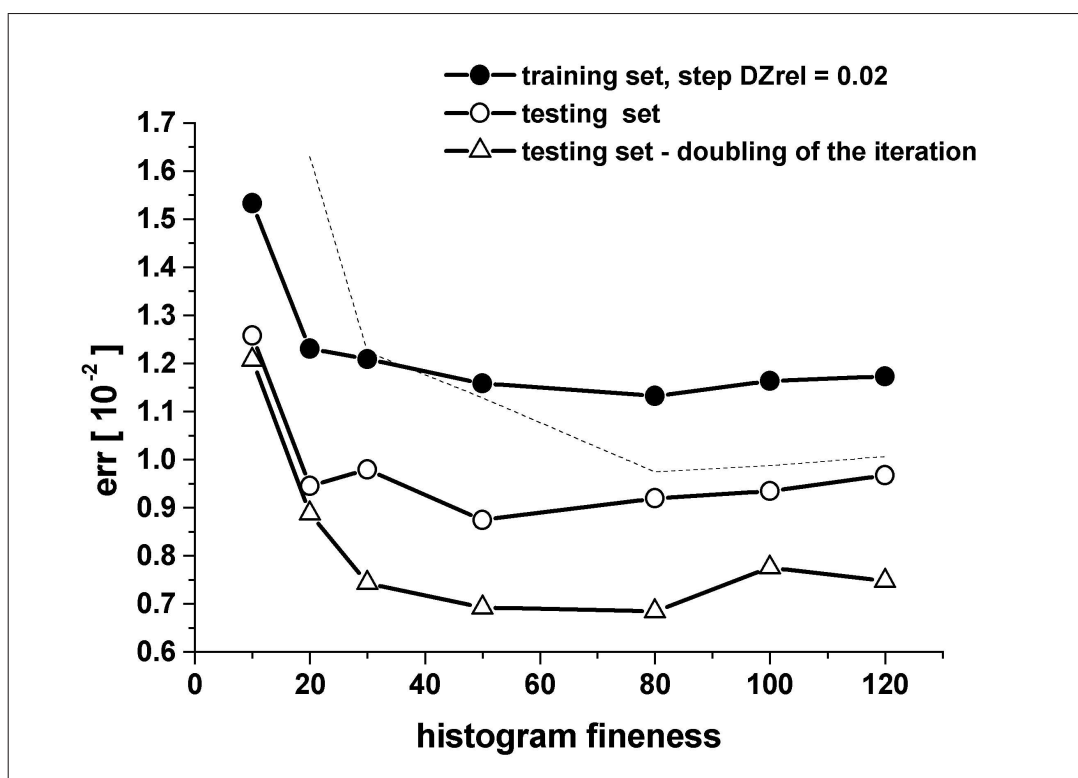


Obrázek 4.8: Grafické porovnání několika variant *RDF* preprocessingu. První číslo v závorce udává velikost maximálního vnitřního poloměru mezikruží r_{max} při nejmenší hustotě (1000 bodů), druhá hodnota vyjadřuje počet mezikruží.

Jednotka = 0.01	RDF (100x100)	RDF (50x50)	RDF (100x50)	RDF (50x100)
E_{tr}	0,8442	0,9760	1,3874	0,5196
E_{test}	1,1144	1,1972	2,9056	0,7709

Tabulka 4.2: Tabulkové porovnání několika variant *RDF* preprocessingu. První číslo v závorce udává velikost maximálního vnitřního poloměru mezikruží r_{max} při nejmenší hustotě (1000 bodů), druhá hodnota vyjadřuje počet mezikruží.

Vliv jemnosti vzorkování dané charakteristiky (jemnost histogramů) jsme zkoumali zatím pouze u *DNN*, avšak předpokládáme, že závěry učiněné na základě obdržených výsledků budou mít obecnou platnost. Vyhodnocení dané závislosti jsme realizovali pro jemnosti dělení (10, 20, 30, 50, 80, 100, 120), obdržené výsledky jsou graficky znázorněny na obr. 4.9.



Obrázek 4.9: Závislost chyby neuronové sítě na jemnosti dělení histogramů rozdělení nejbližších sousedů (*DNN*).

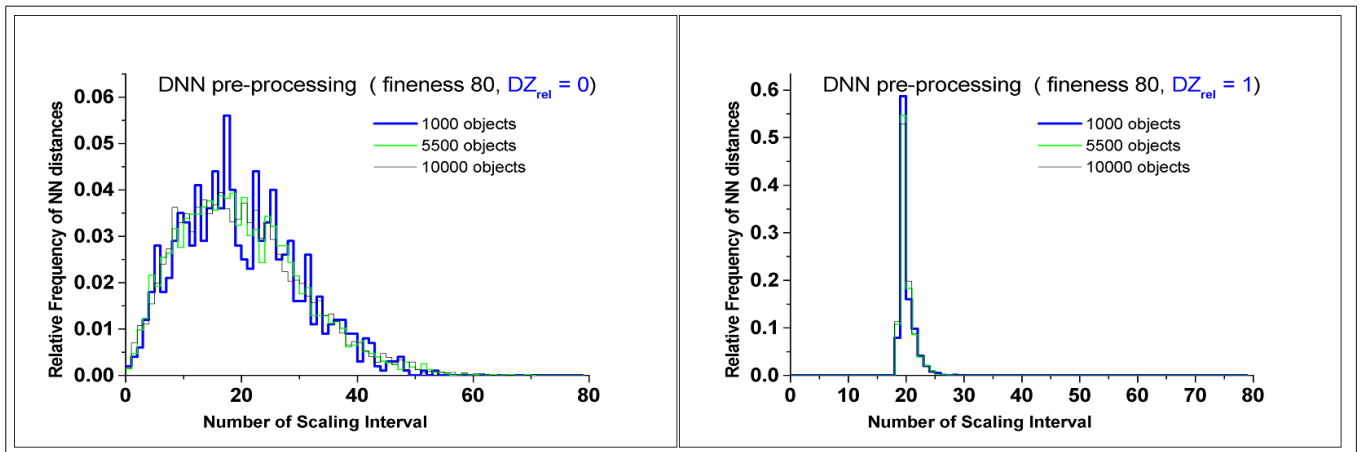
Všimněme si, že dané závislosti nejsou klesající, jak bychom mohli předpokládat. Zobrazené funkce mají v souladu s naším očekáváním nejprve klesající tendenci, ale od určité jemnosti (zhruba 80) se tato tendence mění na mírně rostoucí. Tento poněkud překvapivý fakt si lze vysvětlit následujícím způsobem. Se zvyšující se jemností histogramu se samozřejmě zvyšuje i jeho citlivost na změny ve struktuře. Jak již bylo zmíněno výše, náš model není čistě deterministický. Vygenerujeme-li několik struktur s týmiž parametry (ϱ, DZ_{rel}) budou se následně zkonstruované histogramy lišit. Tento fenomén můžeme na základě těchto několika histogramů kvantifikovat např. pomocí jejich rozptylu, přičemž tento definujeme jako součet rozptylů jednotlivých sloupců histogramu. Tento efekt stochastického prvku hard-disk modelu se bude projevovat více při použití histogramů s vyšší jemností, neboť ty jsou citlivější na změny ve struktuře. Jestliže bude jemnost histogramu příliš vysoká a vzorkování parametru, který se snažíme pomocí NS detekovat, příliš jemné, může se stát, že změna tohoto parametru o vzorkovací krok (u nás 0,01 resp. 0,02) bude srovnatelná s právě popsanou náhodnou fluktuací a pro NS je v takové situaci dosti těžké odlišit např. dva histogramy asociované se strukturami generovanými při téže dvojici parametrů (ϱ, DZ_{rel}) a histogramy, jež přísluší strukturám, z nichž jedna byla generována s parametry (ϱ, DZ_{rel}) a druhá s parametry $(\varrho, DZ_{rel} + \Delta DZ_{rel})$. Naše požadavky na síť se zde dostávají do rozporu. Na jedné straně chceme, aby síť byla do určité míry robustní, tj. aby tolerovala určitý rozptyl ve vstupních vektorech v jednom bodě (ϱ, DZ_{rel}) . Na druhé straně bychom rádi, aby detekovala velmi malé změny parametru DZ_{rel} . Je tedy zřejmé, že zvyšování citlivosti histogramu nemusí vést v našem případě ke snižování chyby neuronové sítě, jak by tomu bylo v situaci, kdyby byl náš model čistě deterministický. Pro ověření výše uvedené argumentace byla navržena charakteristika, jež kvantifikuje informační přínos dané jemnosti dělení histogramů vzhledem k parametru DZ_{rel} a která velmi dobře koresponduje s výsledky neuronové sítě (obr.4.9 – čárkovaná křivka). Jedná se o graf funkce $1.2 \times 10^{-5} \times eff^{-1}$, viz ⁶.

Výsledky

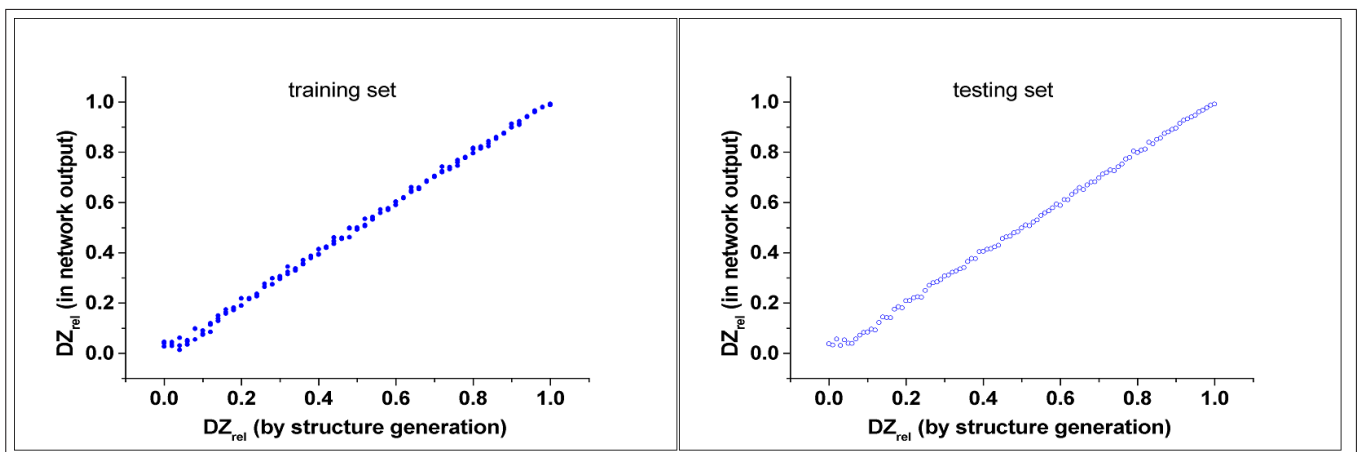
Pro účel detekce míry uspořádanosti bodových struktur (DZ_{rel}) bylo testováno několik morfologických charakteristik a neuronových sítí, viz kapitola 4.1.4. Nejlepších výsledků bylo dosaženo pro vhodně upravené charakteristiky DNN a RDF . Na obrázcích 4.10 a 4.12 jsou zobrazeny právě tyto charakteristiky a to pro 3 různé hustoty maximálně a minimálně uspořádaných bodových struktur. Z obrázků

⁶Míru μ_R vlivu náhodnosti obsažené v algoritmu hard-disk modelu na variabilitu histogramů odpovídajících danému bodu (ϱ, DZ_{rel}) lze kvantifikovat jako rozptyl histogramů (suma rozptylů jednotlivých sloupců) odpovídajících strukturám vygenerovaným v tomto bodě. V tom samém bodě lze míru μ_D s jakou parameter DZ_{rel} determinuje tvar histogramu definovat následovně: Uvažujme dva body (ϱ, DZ_{rel}) a $(\varrho, DZ_{rel} + \Delta DZ_{rel})$. V obou těchto bodech spočítejme z několika histogramů střední histogram \bar{H} a to s cílem minimalizovat vliv náhodnosti a μ_D definujeme následovně $\mu_D = \frac{|\bar{H}(\varrho, DZ_{rel}) - \bar{H}(\varrho, DZ_{rel} + \Delta DZ_{rel})|}{\Delta DZ_{rel}}$. Sumu $\sum_{i=0}^M \frac{\mu_D^i}{\mu_R^i}$ lze považovat za možnou míru informační efektivity (eff) vzhledem k DZ_{rel} při dané hustotě ϱ a jemnosti dělení M . Jelikož pracujeme s histogramy normovanými tak, aby byl maximálně potlačen vliv hustoty bodové struktury na jejich tvar, můžeme výsledky získané touto analýzou pro jednu zvolenou hustotu ϱ zobecnit.

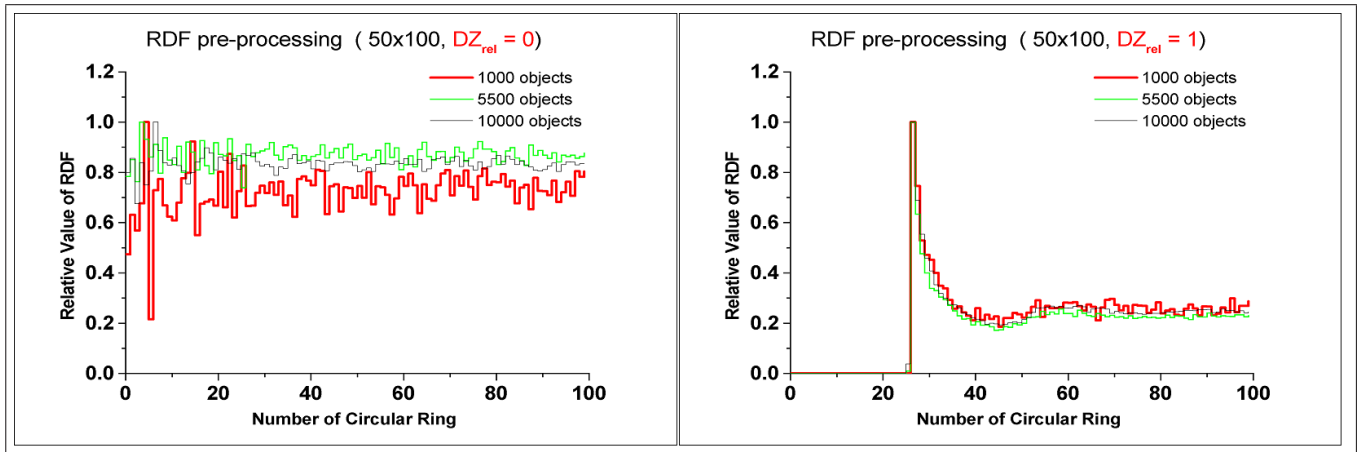
je dobře patrný vliv míry uspořádanosti resp. DZ_{rel} na jejich tvar. Schopnost naučené neuronové sítě detekovat z daných charakteristik parametr DZ_{rel} je ilustrována na obr. 4.11 a 4.13. Jak je patrné z obrázků, výsledky neuronové sítě jsou uspokojivé pro oba způsoby preprocessingu a to jak na tréninkové, tak i na testovací množině dat, viz kapitola 2.2.6. Závislost výsledků sítě na skutečné hodnotě DZ_{rel} se nejvíce liší od ideálního výsledku (identita) v okolí nuly, což je pochopitelné, neboť právě při malých hodnotách DZ_{rel} jsou příslušné morfologické charakteristiky pro pevně zvolené DZ_{rel} nejvíce variabilní či fluktuující, viz kapitola 4.1.4.



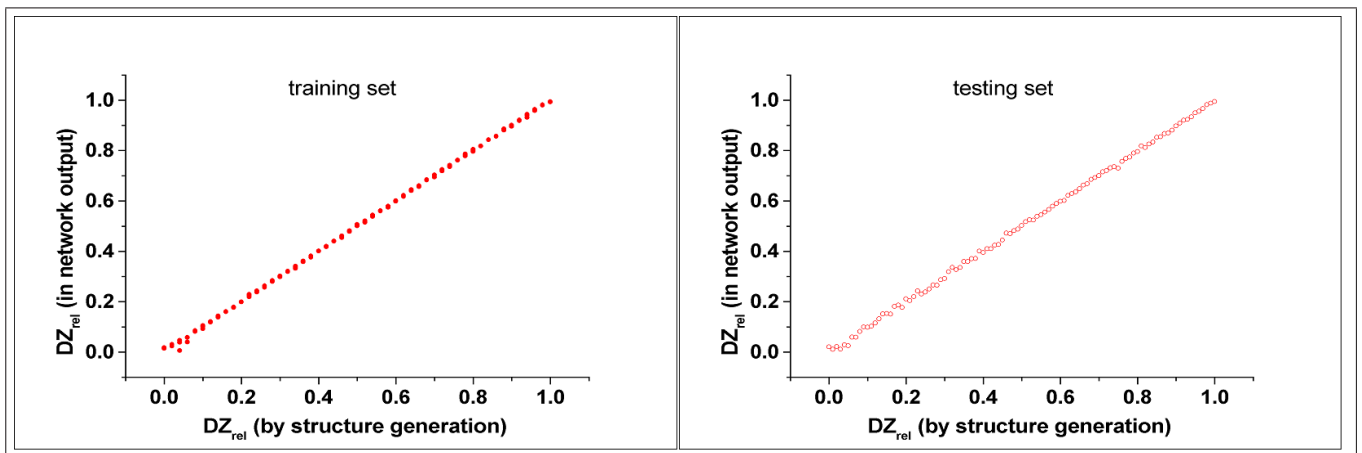
Obrázek 4.10: Vhodně normované grafy rozdělení nejbližších sousedů pro 1000, 5500 a 10000 objektů (vlevo $DZ_{rel} = 0$, vpravo $DZ_{rel} = 1$).



Obrázek 4.11: Korespondence mezi reálnými hodnotami DZ_{rel} (osa x) a výstupy vrácenými neuronovou sítí (osa y) v případě DNN preprocessingu (vlevo výsledky na tréninkové, vpravo na testovací množině struktur), použitá síť 80-30-20-10-1.

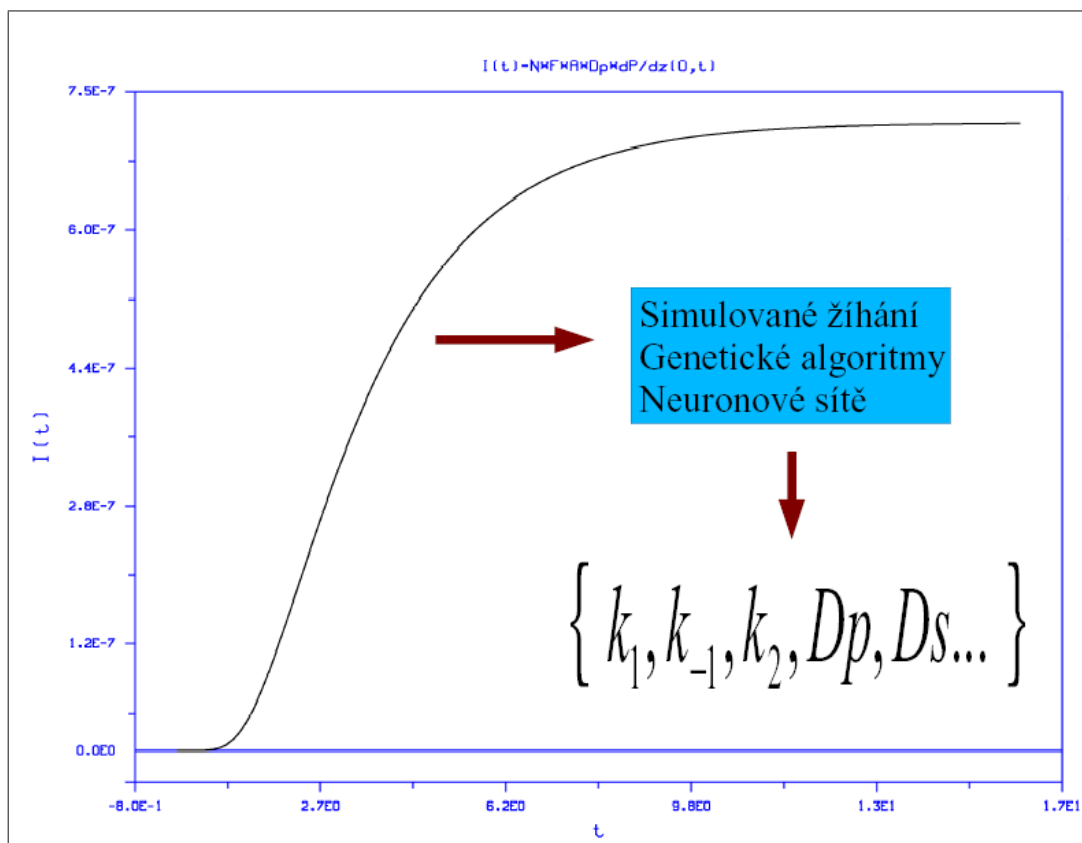


Obrázek 4.12: Vhodně normované ($\frac{RDF}{RDF_{max}}$) grafy Radiální distribuční funkce pro 1000, 5500 a 10000 objektů (vlevo $DZ_{rel} = 0$, vpravo $DZ_{rel} = 1$), použitá síť 100-30-20-10-1.

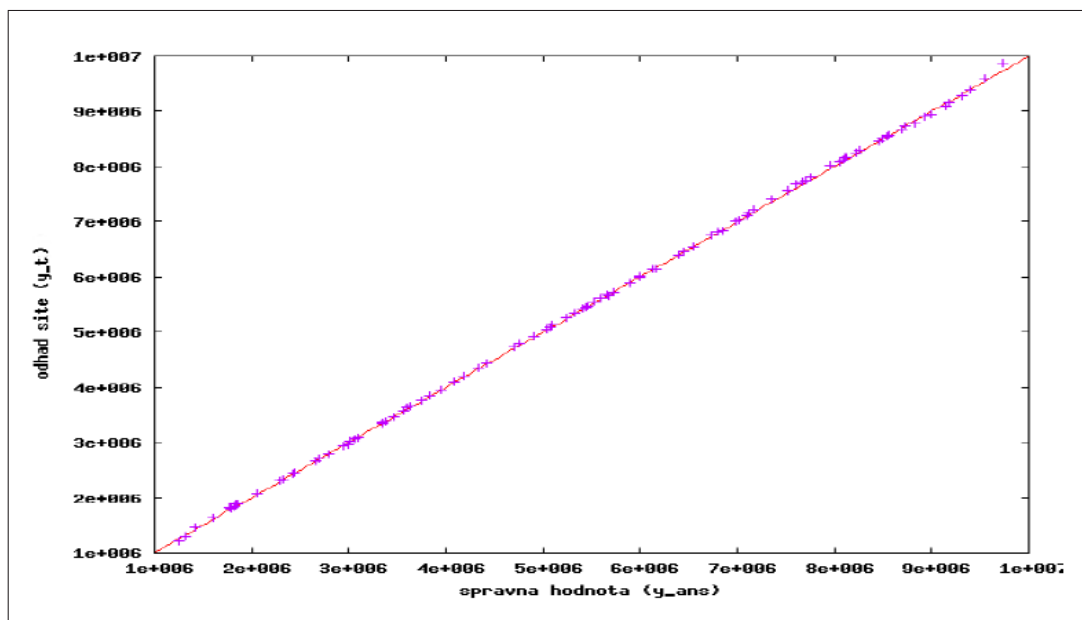


Obrázek 4.13: Korespondence mezi reálnými hodnotami DZ_{rel} (osa x) a výstupy vrácenými neuro-novou sítí (osa y) v případě RDF preprocessingu (vlevo výsledky na tréninkové, vpravo na testovací množině struktur).

Závěrem lze tedy říci, že testování neuronové sítě pro tento typ obrazové analýzy dopadlo úspěšně. Největší přínos však autor nespátřuje v této konkrétní aplikaci, nýbrž v jejím možném zobecnění resp. v zobecnění, metodiky ilustrované obrázkem 4.4 a to pro získávání i několika nezávislých parametrů rozličných systémů či struktur. Autor aktuálně pracuje na analogické aplikaci v níž se neuronová síť používá pro odhad koeficientů figurujících v matematickém modelu enzymatického, amperometrického biosenzoru. Neuronová síť zde analyzuje proudovou odezvu biosenzoru, což je charakteristika, kterou lze získat jak z experimentu, tak i z příslušného modelu. Jedná se o jediný spojovací můstek mezi reálným experimentem a modelem, resp. mezi typem použitých chemických složek (enzym, substrát, aj.) a jejich numerickým obrazem (otiskem) v podobě příslušných konstant vystupujících v soustavě diferenciálních rovnic, popisujících matematický model biosenzoru. Fitování příslušných koeficientů na základě porovnávání modelové proudové odezvy s odezvou experimentální tak skýtá jedinou možnost nastavení příslušných konstant tak, aby model přesně odpovídal konkrétní fyzikální konfiguraci. Základní schema je opět stejné jako v případě určování míry uspořádanosti bodových struktur, jen zde místo bodové struktury figuruje biosenzor, morfologická charakteristika je zde nahrazena proudovou odezvou (viz obr. 4.14) a místo jednoho parametru DZ_{rel} popisujícího míru uspořádanosti bodového systému je zde hned několik parametrů, jež spolu s počátečními a okrajovými podmínkami jednoznačně určují vlastnosti modelu, a které buďto nelze získat experimentální cestou vůbec nebo jen velmi obtížně a mnohdy navíc s neuspokojivou přesností. Neuronová síť zde představuje vedle genetických algoritmů, simulovaného žíhání, apod. nadějný prostředek pro tuto analýzu (viz obr. 4.15), který je navíc ve výpočetním režimu daleko rychlejší než oba zmíněné algoritmy.



Obrázek 4.14: Schema získávání koeficientů matematického modelu amperometrického biosenzoru z proudové odezvy biosenzoru.



Obrázek 4.15: Výsledek testu neuronové sítě, určené k výpočtu koeficientu k_1 na základě proudové odezvy biosenzoru. Osa x reprezentuje skutečné hodnoty koeficientu k_1 , osa y pak hodnoty vrácené neuronovou sítí.

4.2 Rekonstrukce degradovaných obrazů zrnitých struktur pomocí neuronových sítí

4.2.1 Úvod

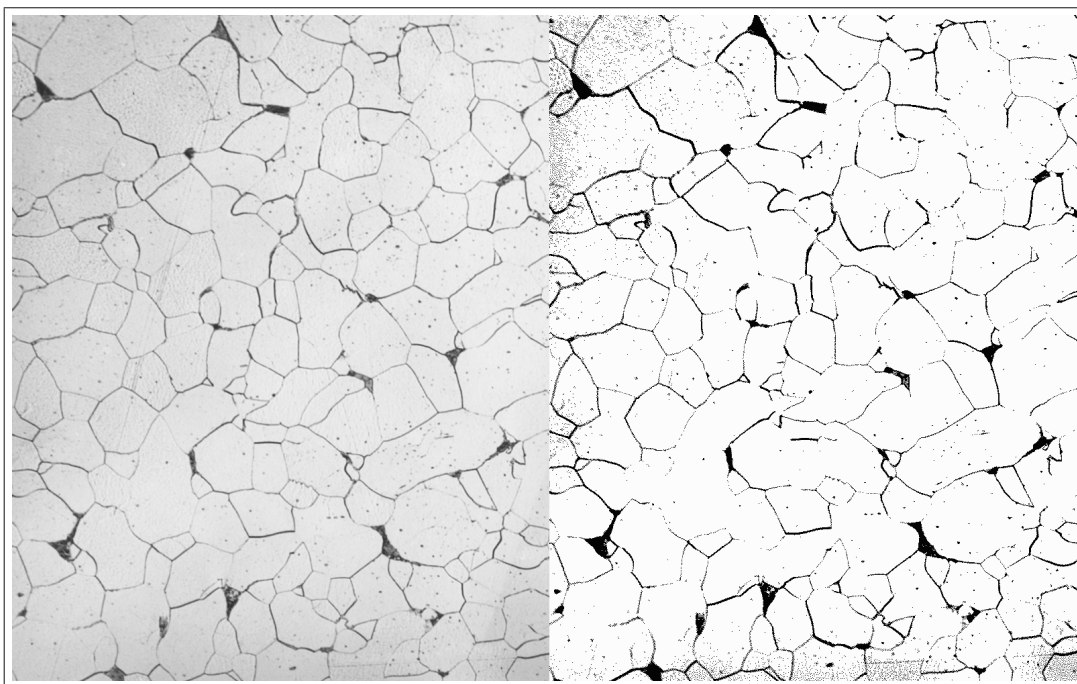
Fyzikální charakteristiky pevných látek (mechanické, optické, vodivostní, atd.) jsou určeny jejich mikrostrukturou. Proto studium této mikrostruktury (2D řezy, výbrusy, povrchy tenkých vrstev) umožněné optickou, AFM či transmisí mikroskopii nám může poskytnout cenné informace o některých materiálových vlastnostech, bez toho abychom museli sledovanou vlastnost zjišťovat mnohdy časově i finančně nákladnější experimentální cestou. Například u většiny polykrystalických materiálů je výše zmíněná souvislost (velikost zrn \times tvrdost) dobře popsána známým vztahem (Hall-Petch) $H = H_0 + kd^{-\frac{1}{2}}$, kde H je tvrdost materiálu, H_0 a k jsou materiálové konstanty a d je střední průměr zrn [6]. Potřebné údaje charakterizující zrnitou strukturu (velikost, tvar, rozložení zrn) lze získat obrazovou analýzou za použití rozličných morfologických metod. Aplikace těchto metod na fotografie řezů, výbrusů, atd. je však podmíněna dostatečnou kvalitou příslušných snímků. V našem kontextu se jedná hlavně o požadavek celistvých hranic zrn. Bohužel ne vždy lze tak kvalitní snímky získat. Hranice zrn mohou být místy i značně narušeny, popř. špatně rozpoznatelné od barvy pozadí. Navíc může být obrázek zatížen šumem. Kvalita (z hlediska rozpoznatelnosti hranic) takového obrázku ještě poklesne jeho binarizací (převedením na černobílý obraz), což je v případě takovéto analýzy nedílná součást morfologické analýzy, která jednoznačně definuje hranice zrn. Tento problém je dobře ilustrován obrázkem 4.16 na němž je znázorněna mikrofotografie ocelového výbrusu a podoba tohoto obrázku po binarizaci.

Problém spočívá v tom, že barvu (úroveň šedi) hranice nelze jednoznačně odlišit od barvy pozadí, takže binarizujeme-li s jakýmkoli prahem ⁷, vždy dochází k další ztrátě informace. Mikrostruktura samotných zrn se promítne do místy i značného rozsahu odstínů šedi na malé ploše. Po binarizaci se tato mikrostruktura projeví jako šum. Eliminace šumu, a hlavně správné doplnění chybějících hranic v poměrně komplikované zrnité struktuře není triviální problém, který byl ve výše ilustrovaném případě řešen zkušeným „dokreslovačem“, tedy člověkem. Dále se budeme zabývat možným použitím vhodné neuronové sítě na automatizované řešení tohoto problému.

4.2.2 Modelové struktury

Jak již bylo řečeno dříve, chceme-li aby se neuronová síť naučila uspokojivě řešit daný problém, musíme jí poskytnout dostatečně reprezentativní tréninkovou množinu, pomocí které vlastně definujeme daný problém. Bohužel nebylo k dispozici pro tento účel dostatečné množství fotografií na kterých by se neuronová síť mohla učit rekonstruovat reálné zrnité struktury. Z tohoto důvodu byly opět použity

⁷Hodnota definující úroveň šedi, pod kterou se v černobílém obrázku vše promítne na černou barvu, a obráceně, nad níž se odstíny šedi zobrazí v černobílém obrázku na bílou.



Obrázek 4.16: Mikrofotografie ocelového výbrusu před (vlevo) a po (vpravo) binarizaci.

struktury modelové. Jako modelové zrnité struktury dobře posloužily struktury Wigner-Seitzových buněk známých též pod názvem „Voronoi tessellation“ (Voronoiovo dláždění, dále jen VT), viz kapitola 2.1.2. Jsou-li objekty kruhové a s různými poloměry, je obecně hranice každé buňky složena ze zakřivených čar. Vhodnou volbou distribuce poloměrů objektů generujících VT ⁸ lze pak zajistit aby příslušné VT bylo, v rámci testování NN pro daný účel, dostačně věrnou náhradou za reálné struktury. Vytvořenou modelovou strukturu (VT) lze pak dle potřeby degradovat, tzn. narušit hranice jednotlivých zrn např. pomocí náhodného generování bílých kruhových terčků, popř. obrázek navíc zašumět. Tímto způsobem lze vytvořit libovolné množství dvojic: (původní (nenarušený) obrázek VT , degradovaný obrázek VT), čímž je splněn základní předpoklad aplikovatelnosti NN , tzn. předpoklad dostatečně reprezentativní tréninkové množiny.

4.2.3 Aplikace neuronové sítě

Úvod

Neuronová síť v tomto případě zpracovávala přímo⁹ obrazovou informaci. Vstupem sítě samozřejmě nebyl celý obrázek (1000×1000 pixelů), už proto, že by paměťové nároky značně překročily možnosti dostupné výpočetní techniky. Obraz celé struktury byl tedy analyzován pomocí malých okének, kon-

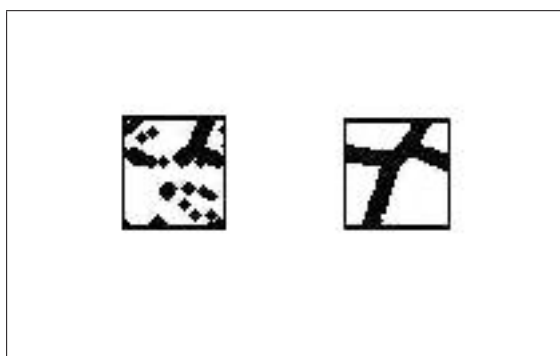
⁸V našem případě bylo použito gausovské rozdělení poloměrů.

⁹Nikoli zprostředkovaně přes nějakou charakteristiku jež by na základě původního obrázku vznikla, jak tomu bylo v předchozí aplikaci.

krétně 40×40 a 25×25 pixelů. Velikost okének byla zvolena s ohledem na velikost zrn, resp. jejich poruch, které měla neuronová síť odstranit. Opět bylo otestováno několik architektur NN . Vybrána byla nakonec dvouvrstvá neuronová síť $X - 100 - X$, kde X bylo 1600 (v případě vstupu 40×40 pixelů) a 625 (v případě vstupu 25×25 pixelů).

Preprocessing

Preprocessing v tomto případě spočíval ve výběru odpovídajících velikostí „vzorkovacích okének“ (vzorkovacích matic) a ve vhodných modifikacích z původního obrazu snímaných vzorků. Tréninkové vzory tedy byly ve tvaru uspořádaných dvojic (okénko s narušenou strukturou, okénko s původní nenarušenou strukturou) obě okénka samozřejmě z téže pozice analyzovaného obrazu. Příklad takového tréninkového vzoru (nemodifikovaného) je znázorněn na obrázku 4.17.



Obrázek 4.17: Příklad tréninkového vzoru pro aplikaci neuronové sítě na rekonstrukci zrnitých struktur.

4.2.4 Postup řešení

a) Řešení pomocí jedné neuronové sítě

Původní myšlenka byla použít pro rekonstrukci struktur jedinou neuronovou síť. Při tomto postupu byly vzorky snímané z degradovaného obrazu (levá polovina obr. 4.17) modifikovány v rámci preprocessingu následovně:

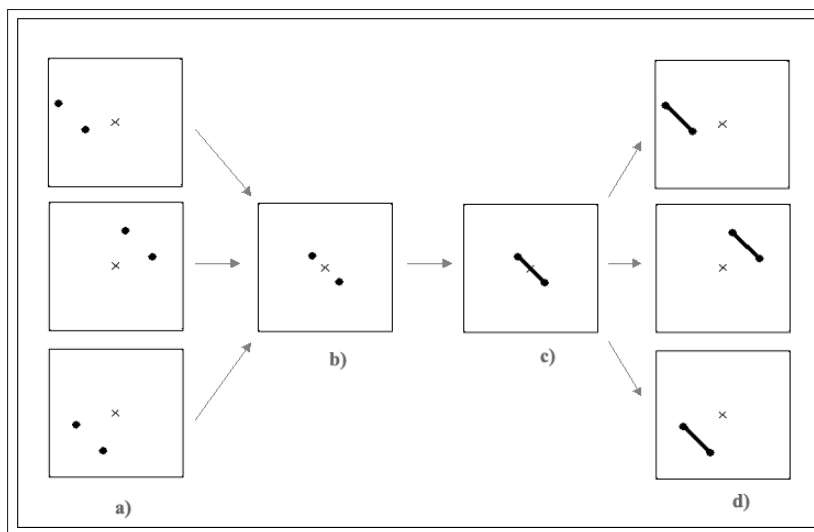
1) Posun těžiště

V rámci vzorku bylo spočítáno těžiště T^{10} , a objekt obsažený ve vzorku, byl následně posunut o vektor $\vec{TS} = S - T^{11}$, kde S je geometrický střed vzorkovacího okénka, a to s cílem redukovat počet navzájem různých vzorků předkládaných ke zpracování neuronové sítě. Všechny možné vzorky lišící se pouze

¹⁰Jedná se o těžiště objektu, které je však zároveň těžištěm celého vzorku, neboť hodnoty prvků matice reprezentující vzorek jsou mimo objekt nulové.

¹¹Realizované posunutí objektu bylo samozřejmě celočíselné tzn. o zaokrouhlené hodnoty TS_x a TS_y .

polohou těžiště se pak zobrazí na jeden jediný. Právě popsaná myšlenka je dobře ilustrována obrázkem 4.18.



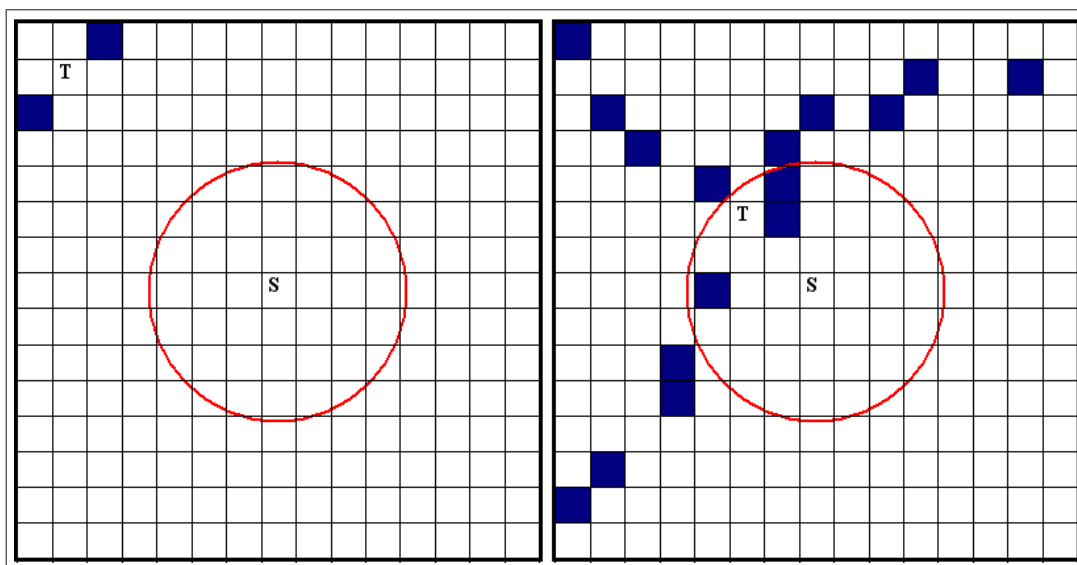
Obrázek 4.18: Redukce odlišných vzorků posunem těžiště.

V části obrázku označené jako a) jsou zobrazeny tři dvoubodové objekty, umístěné ve vždy tak, že se liší pouze polohou svého těžiště v rámci tohoto vzorku. Část b) ukazuje situaci po posunu. Příklad možného výstupu neuronové sítě je v tomto případě je zobrazen v části c). Výsledný objekt je následně posunut zpět tedy o vektor $-\vec{T}\vec{S}$. Aby byla využita pokud možno maximální plocha vzorku a síť se tak mohla učit z reprezentativních vzorků (vzorků s maximálním kontextem), byly později zpracovávány pouze vzorky, jejichž těžiště již při sejmutí bylo v nějakém blízkém okolí ε geometrického středu vzorku¹². Tato myšlenka je ilustrována obrázkem 4.19, v jehož levé polovině je dvoubodový vzorek.

Kromě výše popsaného posunu objektu ve vzorku zajišťujícího invariaci upravených vzorků vůči posunutí vzorků původních byla testována i jednoduchá možnost jak téměř zajistit invariantnost upravených vzorků vůči otočení vzorků původních. Algoritmus byl implementován tak, že posunuté vzorky¹³ byly postupně otáčeny o úhel $\varphi_i = i\Delta\varphi$ a v každé poloze byl vyhodnocen moment setrvačnosti objektu obsaženého ve vzorku, vzhledem k ose procházející jeho těžištěm a kolmé k vodorovným stranám vzorku. Výsledná modifikace původního vzorku pak spočívala v jeho natočení o úhel $\varphi_{i_{max}}$ takový, že příslušný moment setrvačnosti J_i vzhledem k výše popsané ose byl maximální. Bohužel tento krok, podstatně zpomalující jak preprocessing tak zpětnou rekonstrukci, nepřinesl zřetelné zlepšení očekávané především při rekonstrukci testovacích vzorků, neboť výsledky při rekonstrukci vzorků tréninkových byly velmi uspokojivé i bez otáčení. Očekávané vylepšení zobecňovacích vlastností neuronové sítě se tedy bohužel neprojevovalo. Zjištěný fakt si autor neumí zcela uspokojivě vysvětlit. Částečně byl tento dílčí neúspěch způsoben určitou deformací tvaru objektu, zobrazeného na diskrétní mřížce, při otočení o úhel $\varphi_{i_{max}}$. Nicméně tento negativní jev by měl být dle autora zanedbatelný v porovnání s přínosem

¹² $\varepsilon \doteq 0.2d$, kde d je délka strany vzorku.

¹³Při otáčení se uvažovala jen ta část posunutého objektu, která se při libovolném natočení vešla do vzorku.



Obrázek 4.19: Nepřijatý (vlevo) a přijatý (vpravo) vzorek.

(téměř zajištění rotační invariantnosti), obzvláště pak v kontextu s následným rozmazáním objektu, viz dále.

2) Rozmazání objektů

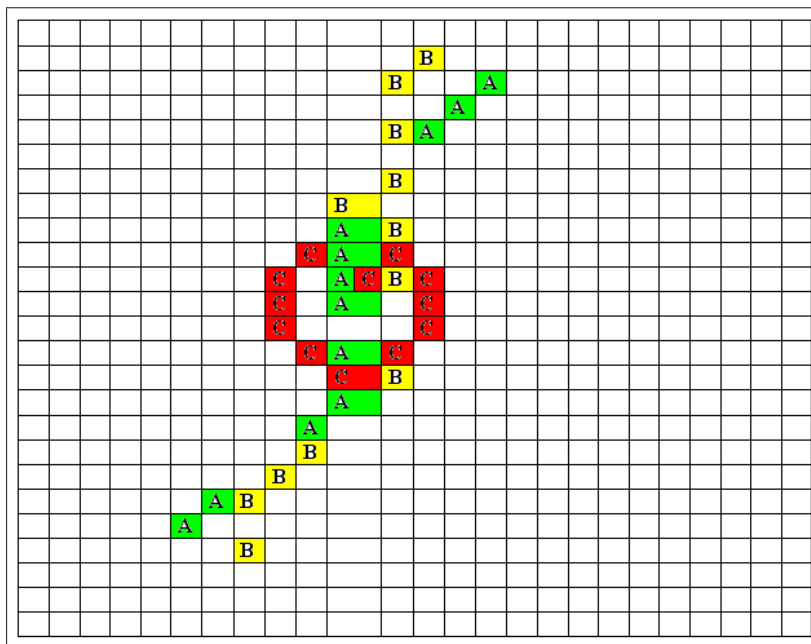
Na obrázku 4.20 jsou zobrazeny tři překryté vzorky 25×25 A, B, C . V každém z nich je jiný objekt. Vzorky A, B jsou si na první pohled dosti podobné, avšak vzorek C se od obou vizuálně dost liší (viz též horní část obrázku 4.22).

Uvažujme nyní tyto vzorky jako matice, jejichž prvky mají hodnotu 1 odpovídají-li pixelu objektu a hodnotu 0 v opačném případě. Z hlediska euklidovské metriky je pak vzorek (matice) C bližší vzorku A než matice B ¹⁴, což je naprosto v rozporu s vizuálním vjemem. Nás ovšem zajímá pohled neuronové sítě. Jak ta „vidí“ podobnost či naopak rozdílnost vzorků A, B, C , resp. v jaké relaci budou hodnoty $|A' - B'|, |A' - C'|, |B' - C'|$, kde A', B', C' jsou výstupy sítě odpovídající vstupům A, B, C ? Na tuto otázku nelze v obecné rovině jednoznačně odpovědět, takže např. z $|A - B| < |A - C|$, ještě automaticky neplyne, že $|A' - B'| < |A' - C'|$ záleží samozřejmě na tom, jak jsou u dané sítě nastaveny váhy, což zase závisí na tom na jaké tréninkové množině se síť učila.

Obecná *limitní* odpověď však zní: Pro každý vstup neuronové sítě $A \in R^n$ existuje $\delta \in R$, takové, že pro všechna X z δ -okolí bodu A bude neuronová síť hodnotit vstupy v naprostém souhlasu s euklidovskou metrikou, tzn. bude-li pro libovolné dva body X_1, X_2 z δ -okolí bodu A platit $|A - X_2| < |A - X_1|$, pak bude platit i $|A' - X_2'| < |A' - X_1'|$, neboť funkce $f : R^n \rightarrow R^m$, kterou uvažovaná neuronová síť realizuje, je spojitá¹⁵.

¹⁴Objekty ve všech třech vzorcích jsou složeny ze 12-ti pixelů ovšem dvojice objektů z A, C má narozdíl od objektů v A, B nenulový průnik, takže $|A - C| = \sqrt{22} < |A - B| = \sqrt{24}$

¹⁵Jak potenciál ξ , tak přenosová funkce $\sigma(\xi)$ každého neuronu, jsou spojitě funkce.

Obrázek 4.20: Tři různé, navzájem překryté vzorky (25×25 pixelů) A, B, C.

Vraťme se však nyní k našim třem konkrétním vzorkům A , B , C a uvažujme v úvodu specifikovanou síť určenou na zpracování vzorků 25×25 , tzn. dvouvrstvou síť $625-100-625$ ¹⁶, jejímž úkolem je rekonstrukce (doplnění) narušených objektů obsažených ve vzorcích. Budeme-li takovou síť učit rekonstrukci pouze na jednoprvkové tréninkové množině $\{\langle A, d_A \rangle\}$, kde d_A je požadovaný výstup pro vstup A , nemůžeme od této sítě očekávat o mnoho uspokojivější rekonstrukci vzorku B než u jakéhokoli jiného vzorku, obsahujícího dvanácti-pixelový objekt. K tomu aby síť uspokojivě zvládla rekonstrukci vzorku B , by ve tréninkové množině musel být obsažen takový tréninkový vzor, který by ve vstupním vzorku obsahoval objekt do značné míry se překrývající s objektem v B , nebo by zde muselo být více takových tréninkových vzorů, které by obsahovaly ve vstupních vzorcích objekty, které by se s objektem v B překrývaly alespoň na několika různých místech. Velikost a tvar tréninkových objektů by měl zhruba odpovídat objektu B , jinak např. při znatelně větších objektech by při rekonstrukci vzorku B hrozilo zašumění, což je samozřejmě nežádoucí jev, byť doprovázející celkem uspokojivou rekonstrukci příslušného objektu.

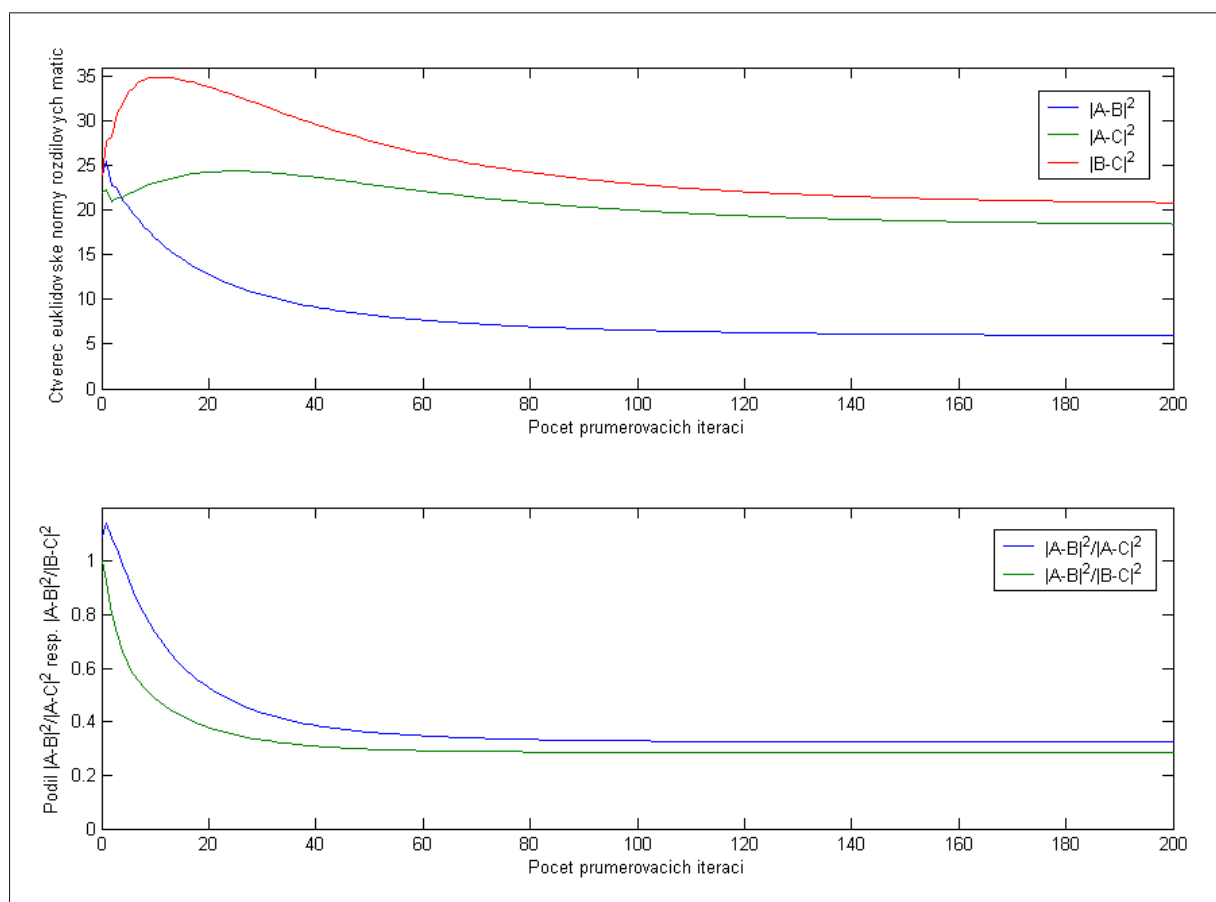
Celý problém neuspokojivé reprezentativnosti vzorku A vzhledem k vzorku B tkví v tom, že objekty ve vzorcích A , B jsou disjunktní a ač se z optického hlediska téměř kopírují, „nevědí o sobě“. Jednou z možností jak tento problém minimalizovat je, že původně binární vzorek poněkud rozmazeme resp. vhodně rozšíříme informaci o objektu i do jeho okolí. Euklidovská metrika resp. neuronová síť je pak schopna dívat se na takové vzorky „lidskýma“ očima, má lepší zobecňovací vlastnosti a učební proces lépe konverguje.

Z obrázku 4.21 je patrné, jak blahodárny vliv má na vzorky A , B , C laplaceovské rozšiřování informace

¹⁶ $625 = 25^2$

o objektu do jeho okolí. Tato úprava spočívá v iteračním procesu, který se běžně používá k numerickému výpočtu elektrického potenciálu v ohraničené oblasti, známe-li hodnotu potenciálu na její hranici, tzn. k řešení Laplaceovy rovnice. V průběhu každé iterace se za hodnotu každého pixelu, resp. členu odpovídající matice, dosadí průměrná hodnota jeho sousedů.

Vidíme, že s přibývajícemi iteracemi, které postupně rozšiřují informaci o objektu po celém vzorku a v každém jeho bodě zpřesňují platnost vztahu $X_{ij} = \frac{1}{4}(X_{i-1,j} + X_{i+1,j} + X_{i,j-1} + X_{i,j+1})$, se euklidovská vzdálenost vzorků A, B snižuje a naopak vzdálenost vzorků A, C a B, C se zvyšuje. Euklidovská norma má na takto upravených vzorcích lepší rozlišovací schopnost, jež je o poznání blíže vnímání lidského oka a výsledky neuronové sítě se pak více blíží k tomu, co bychom očekávali resp. k výsledkům k nimž by došel např. ten zkušený dokreslovač, zmíněný v úvodu.

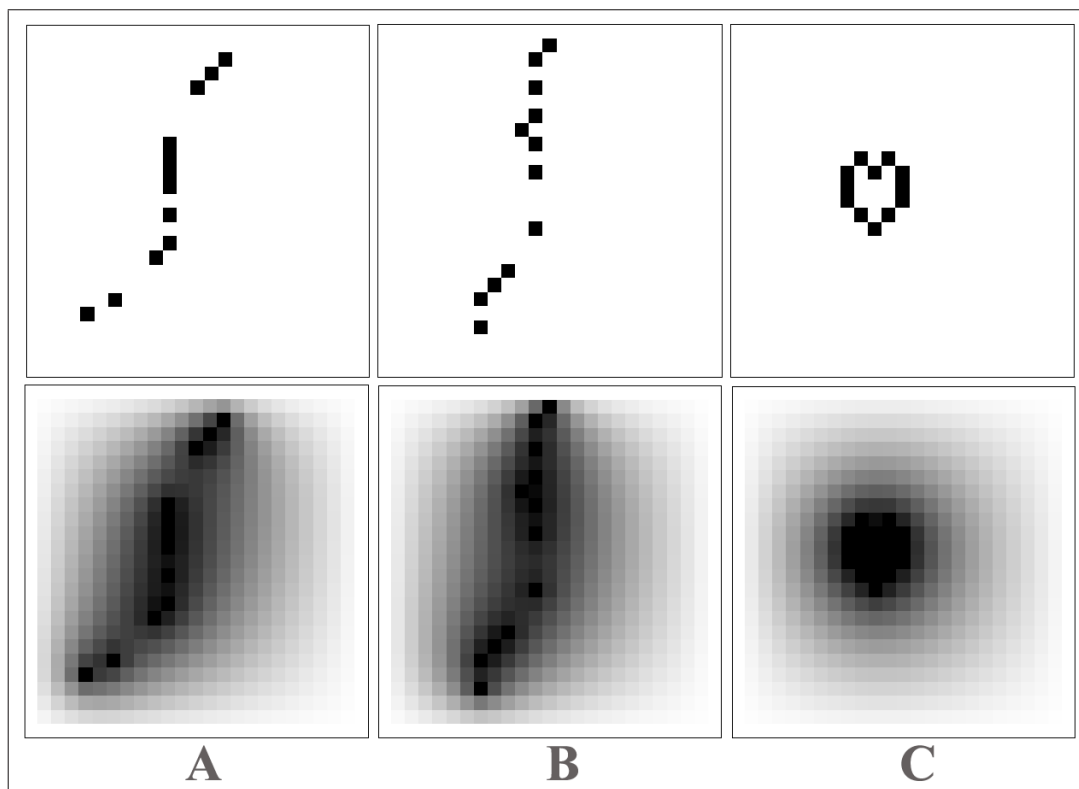


Obrázek 4.21: Vývoj vzdáleností modifikovaných vzorků A, B, C v průběhu Laplaceovského rozmazání.

Sada původních a modifikovaných vzorků A, B, C je zobrazena na obrázku 4.22.

Vhodné rozmazání vzorků tedy jednak urychluje učební fázi (podobné vzorky si „více pomáhají“) a jednak jsou po ukončení učební fáze lepší i zobecňovací vlastnosti sítě (viz výše).

Možností jak rozšířit informaci o objektu do jeho okolí, je samozřejmě mnoho např. při zpracování



Obrázek 4.22: Tři různé vzorky před a po laplaceovském rozmazání (200 iterací).

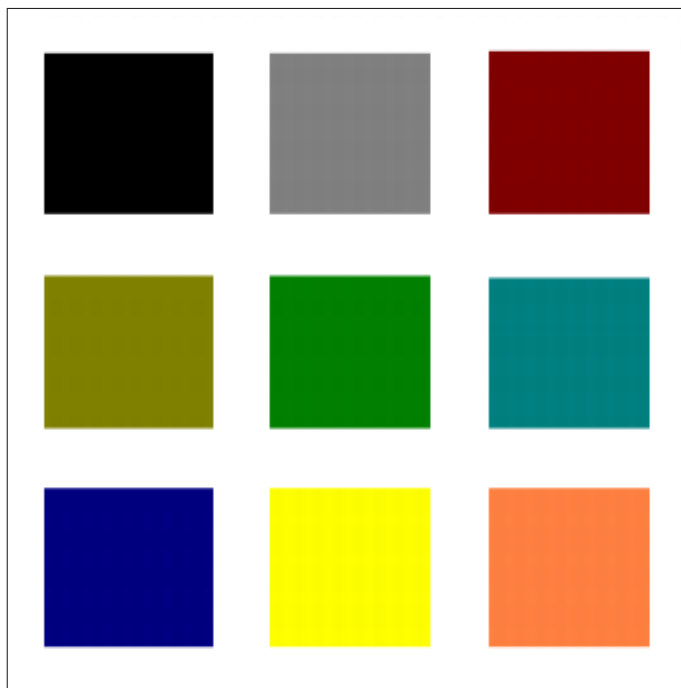
vzorků odpovídající publikovaným výstupům viz kapitola 4.2.4, bylo využito jednorázového použití konvoluční masky o straně cca $0.25 \times$ strana vzorku. Výše popsané laplaceovské rozmítnutí, autor testoval až dodatečně a to hlavně pro zjištění vývoje vzdáleností vzorků *A*, *B*, *C* v závislosti na velikosti okolí do něhož byly příslušné objekty rozmazány. Tento způsob úpravy vzorků bude pro daný účel patrně vhodnější neboť se mj. ukazuje, že je přínosné vhodně rozprostřít objekt po celém vzorku.

b) Řešení pomocí více neuronových sítí

Výše uvedený posun těžiště vzorku byla úprava redukující počet navzájem různých vstupů neuronové sítě v rámci tréninkové množiny. Vzorky lišící se původně pouze polohou těžiště splynuly, a vzorky s tvarově podobnými a stejně natočenými objekty se promítly na sobě bližší vzorky, čímž se i urychlil učební proces. Upravené vzorky se staly invariantními vůči posunutí vzorků původních. Jinými slovy, upravená tréninková množina pak lépe odpovídala našemu problému spočívajícímu v rozpoznávání objektů rozličných tvarů a jejich případné rekonstrukci.

Problém redukce tréninkové množiny lze však vyřešit i zcela jiným způsobem, spočívajícím ve vhodném rozdělení všech myslitelných vzorků do několika disjunktních tříd, v důsledku čehož se jakákoli původní tréninková množina rozdělí na několik disjunktních podmnožin, které poslouží jako tréninkové množiny pro příslušný počet neuronových sítí. Každá neuronová síť se pak bude učit jen na určité podmnožině

původní tréninkové množiny a bude následně použita pouze pro rekonstrukci takových vzorků, které splňují příslušné klasifikační kritérium. Úspěšnost tohoto přístupu pak zjevně souvisí právě s volbou vhodných klasifikačních kritérií. Na obrázku 4.23 je znázorněno testované rozdělení všech myslitelných vzorů do devíti¹⁷ disjunktčních tříd dle pozice těžiště vzorku.



Obrázek 4.23: Rozdělení vzorků do devíti tříd dle pozice těžiště vzorku.

Na vzorky ve všech třídách bylo stejně jako v případě zpracování jednou neuronovou sítí aplikováno rozmazání pomocí konvoluční masky.

Rekonstrukce obrazu

Rekonstrukce obrazu narušené zrnité struktury probíhala v obou případech analogicky. Postupně snímané vzorky byly nejprve výše popsáním způsobem modifikovány a následně předloženy k vyhodnocení neuronové sítí (sítím). Každý pixel tak byl vyhodnocen několikrát, vždy na jiné pozici ve vzorku. Například každý pixel vzorku, jehož vzdálenost od každé strany vzorku byla větší nebo rovna straně vzorku d , byl vyhodnocen d^2 krát. Jelikož byla jako přenosová funkce použita logistická sigmida, byla danému pixelu při každém vyhodnocení přidělena hodnota z intervalu $(0, 1)$. Výsledná hodnota daného pixelu byla určena jako střední hodnota ze všech hodnot, jež mu byly během rekonstrukce postupně přiděleny. Tato hodnota pak samozřejmě také náležela do intervalu $(0, 1)$. Poslední fáze rekonstrukce tudíž spočívala v prahování (binarizaci) spočívající v převedení stávajících hodnot pixelů na hodnoty 0, 1 pomocí vhodně zvolené prahové hodnoty $PT \in (0, 1)$. Jelikož při práci s modelovými strukturami jsou k dispozici vždy obě struktury (narušená a původní nenarušená), mohla být optimální prahová hodnota zjištěna experimentálně jako hodnota prahu, při jehož použití byl rekonstruovaný obraz nejbližší

¹⁷Přesněji řečeno do deseti tříd, avšak vzorky jejichž těžiště padlo do bílého prostoru nebyly brány do úvahy.

původnímu (nenarušenému) obrazu zrnité struktury.

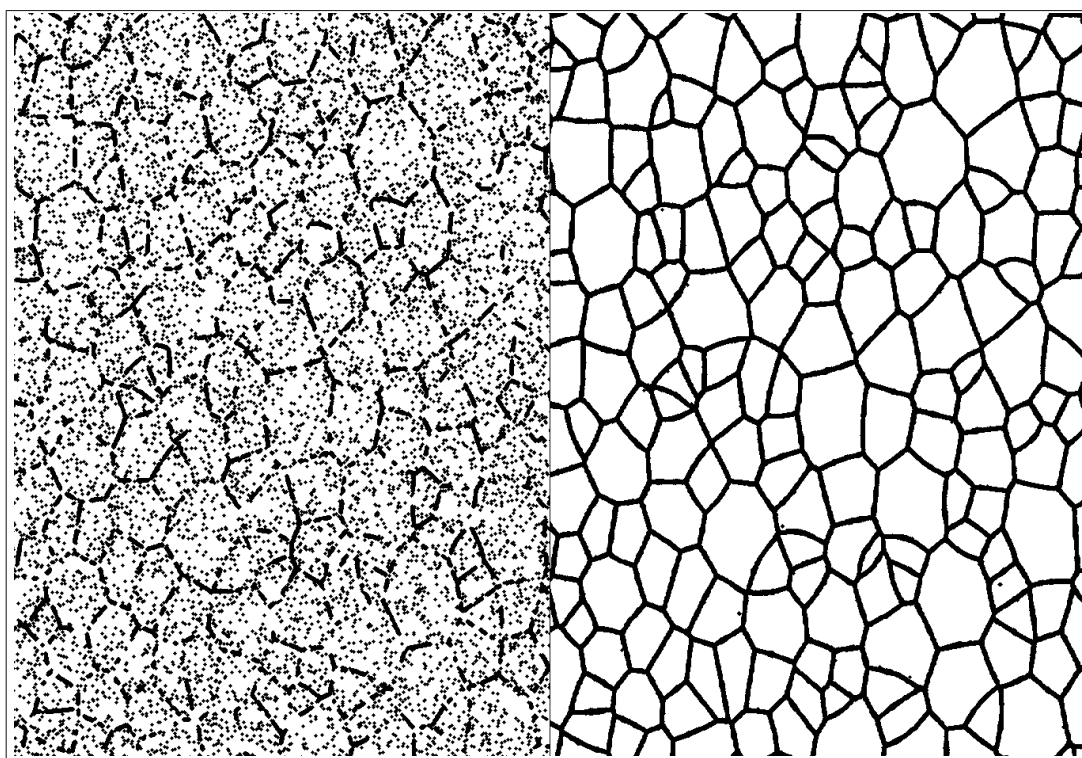
Výsledky

Výsledky na tréninkové množině

Výsledky neuronových sítí (při obou přístupech) dosažené na tréninkových vzorech byly velmi uspokojivé. Jinými slovy, naučená síť byla schopna velmi dobře si zapamatovat jak má rekonstruovat narušené vzorky z tréninkové množiny. Na obrázku 4.24 vidíme, jak rekonstrukci narušených vzorků 40×40 , resp. vstupů NN z „obří“ třítisícové¹⁸ tréninkové množiny, zvládla síť v rámci prvního přístupu (jedna síť, posun těžiště, rozmazání). Vzorky které posloužily ke tvorbě tréninkových vzorů (viz obr. 4.17) byly odebírány z různých, náhodně volených pozic narušeného a nenarušeného, obrazu modelové struktury. Po ukončení adaptační fáze (učení) sítě, jí byly postupně předkládány narušené vzory z tréninkové množiny, které síť následně vyhodnotila resp. zrekonstruovala. Množina všech takto rekonstruovaných¹⁹ tréninkových vstupů je zobrazena v pravé části obrázku 4.24. Díky jejich množství pokrývají i přes svůj náhodný výběr celý původní obraz (1000×1000 pixelů), jenž je takřka k nerozpoznání od obrazu původní nenarušené struktury. Rekonstrukce na tréninkové množině pomocí druhého přístupu (9 sítí) dopadla obdobně.

¹⁸Počet všech polohou se lišících vzorků 40×40 je $960^2 = 921600$

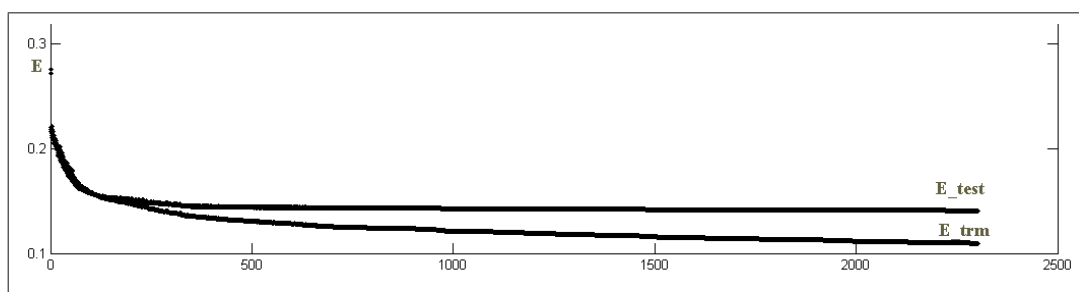
¹⁹V pojmu „rekonstruovaný“ je už zahrnuto závěrečné prahování.



Obrázek 4.24: Narušená struktura (vlevo) a její rekonstruovaná podoba (vpravo). Rekonstrukce spočívala ve vyhodnocení 3000 náhodně vybraných vzorků obsažených v tréninkové množině.

Výsledky na testovací množině

Výsledky na testovacích množinách byly již uspokojivé poněkud méně a to v rámci obou přístupů. Na obrázku 4.25 je zobrazen typický průběh chyb na tréninkové (E_{trm}) a na testovací (E_{test}) množině při učení neuronové sítě na výše uvedených vzorcích. Zpočátku obě chyby klesají, a to téměř stejně rychle, avšak od určitého okamžiku klesající tendence chyby E_{test} takřka mizí a dokonce může dojít i k jejímu růstu. Jedná se o tzv. projev přeučení sítě (viz kapitola 2.2.6), který obecně závisí na bohatosti architektury neuronové sítě, resp. počtu volných parametrů sítě (vah), ale i na délce učebního procesu. Jakmile se tedy v rámci učení sítě monitorovaná chyba E_{test} přestane uspokojivě snižovat, či se dokonce začne zvyšovat, nemá smysl dále pokračovat v učení sítě, i kdyby chyba E_{trm} stále klesala dostatečně rychle, neboť další učení by již téměř (či vůbec) nezlepšovalo zobecňovací schopnosti sítě – spíše naopak. Právě architektura sítě a preprocessing mají (v rámci dané aplikace) rozhodující vliv na to, kdy a při jakých hodnotách se ony pomyslné nůžky mezi E_{trm} a E_{test} začnou rozevírat.

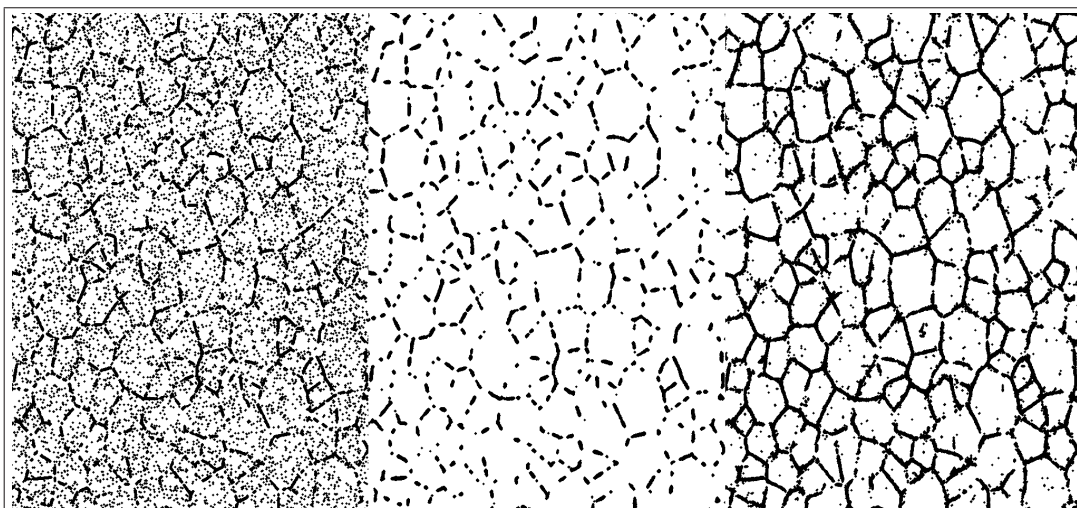


Obrázek 4.25: Grafy závislosti chyby neuronové sítě na počtu absolvovaných tréninkových cyklů a to jednak na tréninkové (E_{trm}), tak i na testovací množině (E_{test}).

Míra úspěšnosti rekonstrukce narušené struktury vyhodnocením všech 921 600 polohou se lišících vzorků²⁰ 40×40 a to pro oba přístupy je ilustrována obrázkem 4.26. Jak vidno v rámci obou přístupů byl uspokojivě odstraněn šum. Jinými slovy schopnost identifikovat nežádoucí shluky rozptýlených bodů byl dobře zobecněn. Na druhé straně zobecnění rekonstrukční schopnosti je již uspokojivé méně a od výsledků rekonstrukce pouze pomocí tréninkových vzorů se zřetelně liší.

Nicméně obdržené výsledky ukazují, že použití neuronových sítí pro rekonstrukci obrazu zrnitých (případně i jiných) struktur naznačeným způsobem je možné. Jedná se však o velmi komplexní problém jehož uspokojivé řešení je závislé především na nalezení vhodného preprocessingu (zde předzpracování obrazové informace), který může zahrnovat nejen vhodné úpravy původní obrazové informace, ale případně i její transformaci (Fourierova, waveletová [4, 5], aj.) a práci s takto transformovanou reprezentací. Jak již bylo řečeno v kap. 4.1.3, preprocessing by měl především vhodně (tak aby zůstala zachována dostatečná informace o vlastnostech, které má neuronová síť analyzovat) redukovat původní (bez preprocessingu) dimenzi vstupu neuronové sítě, a tím mj. minimalizovat rozličnost množiny všech myslitelných vstupů neuronové sítě, což pozitivně ovlivňuje zobecňovací vlastnosti naučené sítě. V případě rekonstrukce obrazu zrnitých struktur představuje právě splnění tohoto cíle preprocessingu dosti

²⁰přesněji řečeno těch, které prošly příslušným ε -kritériem



Obrázek 4.26: Narušená struktura (vlevo), výsledek její rekonstrukce pomocí jedné neuronové sítě (uprostřed), výsledek rekonstrukce pomocí devíti neuronových sítí (vpravo).

náročný problém, jehož uspokojivé řešení bude cílem dalšího výzkumu. Jak bylo uvedeno v úvodu kapitoly 4.2, rekonstrukce obrazů zrnitých struktur zde představovala jen určitý mezikrok pro jejich další analýzu. V tomto případě byla rekonstrukce nutným krokem pro získání informace o rozdělení efektivních průměrů²¹ zrn, ze kterých byla struktura složena. Pro takovéto případy se v souvislosti s použitím neuronových sítí nabízí myšlenka vynechání rekonstrukční fáze a použití neuronové sítě přímo pro určování cílové analyzované vlastnosti na základě neúplné (degradované) obrazové informace. Jednalo by se tedy o stejný přístup, který byl navržen a úspěšně otestován v případě určování míry uspořádanosti mnohaobjektových systémů. Vhodným preprocessingem by pak mohla být opět některá z klasických morfologických charakteristik (např. kovariance či Chord-length distribution, fraktální analýza atd.). I tento „bezrekonstrukční“ přístup bude předmětem dalšího studia.

²¹Jedná se o průměr kruhu, jehož obsah je totožný s obsahem daného zrna.

Kapitola 5

Závěr

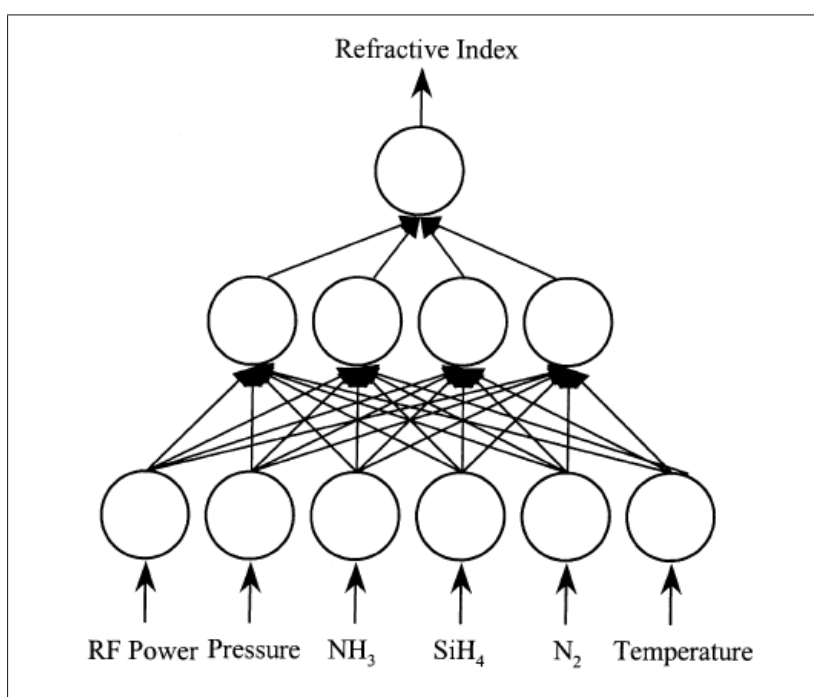
V této práci byla rozpracována metodika použití neuronových sítí ve dvou oblastech obrazové analýzy. Jednak byla navržena a úspěšně otestována metodika použití neuronových sítí pro analýzu míry uspořádanosti mnohaobjektových systémů, dále pak byla studována možnost využití neuronových sítí pro rekonstrukci obrazů zrnitých struktur, kde bylo dosaženo pouze dílčího úspěchu, který však jasně naznačuje, že rozpracovaný způsob rekonstrukce obrazu je smysluplný. Dosažení uspokojivějších výsledků právě v oblasti rekonstrukce obrazu je podmíněno především nalezením optimálního preprocessingu, čemuž je třeba věnovat ještě určité úsilí.

Pro aplikace, kde rekonstrukce obrazu tvoří jen určitý mezičlánek obrazové analýzy (což je i tento případ), se pak alternativně nabízí myšlenka vypuštění rekonstrukční fáze a použití neuronové sítě přímo pro analýzu požadovaných parametrů (jako zde např. střední hodnota průměru zrn, viz závěr kapitoly 4.2.4).

Metodika navržená pro určování míry uspořádanosti mnohaobjektových systémů přinesla naopak velmi uspokojivé výsledky a po jejím úspěšném otestování na modelových hard-disk strukturách ji lze nyní použít i k analýze reálných fotografií, např. při studiu nespojitých Ag vrstev připravených na dielektrických podložkách, pro sledování změn uspořádání kovových ostrůvků během růstu vrstvy, apod. Hlavní myšlenkou tohoto přístupu je aplikace neuronové sítě na vybranou morfologickou charakteristiku, která zde hraje roli preprocessingu. V rámci práce bylo vzhledem k tomuto účelu testováno hned několik morfologických charakteristik, přičemž nejlepších výsledků bylo dosaženo s *RDF* a *DNN*. Dále byla vyvinuta i zcela originální morfologická charakteristika (*HDED*, viz kapitola 4.1.4) poskytující na rovnoměrně rozložených strukturách podobné výsledky jako *DNN*, ovšem lépe použitelná pro studium struktur klasterizovaných. Postup analýzy byl dále optimalizován jak vzhledem k architektuře neuronové sítě, tak i vzhledem k jemnosti vzorkování morfologických charakteristik. Nemalý význam autor přikládá i možnému zobecnění této metodiky a jejímu použití pro určování nejrůznějších parametrů fyzikálních a jiných systémů. V současné době autor pracuje mj. na implementaci této metodiky v oblasti biosenzorů, a již první výsledky jsou velmi slibné (viz

závěr kapitoly 4.1.4). Autor též zamýšlí použít podobný postup v oblasti modelování polymerních nanokompozitů¹. Při analýze reálných systémů pomocí neuronových sítí, jež byly trénovány (učeny) na modelových strukturách, je však vždy třeba určité obezřetnosti, neboť interpretace výsledků vrácených neuronovou sítí je samozřejmě závislá na věrnosti použitého modelu. V případě, že se neuronová síť může učit přímo z reálných dat (skutečné fotografie, experimentálně získané (naměřené) hodnoty parametrů, které má neuronová síť určovat), tento problém samozřejmě odpadá.

Neuronové sítě postupně pronikly do mnoha oborů lidské činnosti. V poslední době se tento fenomén objevuje stále častěji i v souvislosti s nejrůznějšími fyzikálními aplikacemi, což dobře ilustruje obr. 5.1 převzatý z [18].



Obrázek 5.1: Schema použití neuronové sítě pro výpočet indexu lomu SiN vrstev.

¹Neuronové sítě zde budou použity k predikci výsledných vlastností nanokompozitu a to na celých spojitých oblastech vstupních parametrů (množství nanočástic, teplota, hustota monomerů, parametry interakčních potenciálů atd.). Účelem této predikce bude stanovení vstupních parametrů tak, aby se vlastnosti výsledného nanokompozitu co nejvíce blížily vlastnostem požadovaným.

Tato práce z oblasti obrazové analýzy, která je postavená především na autorových originálních výsledcích z let 2000 – 2003, je jen malým příspěvkem k mnohem širší a obecnější problematice. Pozornému čtenáři však může nastínit možnosti využití neuronových sítí i pro řešení zcela jiných fyzikálních a dalších problémů.

Použitá a doporučená literatura

- [1] Novák S., Hrach R., Sobotka M. : *Morphology of composite films: a computer study*, *Superficies y Vacío* 9, 248–252, Diciembre (1999).
- [2] Yu X., P. M. Duxbury , G. Jeffers , M. A. Dubson: *Coalescence and percolation in thin metal films*, *Phys. Rev. B* 44, Issue 23, 13163,-13166 (1991).
- [3] Ebeling H., Wiedenmann G.: *Detecting structure in two dimensions combining Voronoi tessellation and percolation*, *Phys. Rev. E* 47, Issue 1, 704–710 (1993).
- [4] Boldys, J. Hrach, R. : *Multiscale semicontinuous thin film descriptors*, *Cent. Eur. J. Phys.*, 2 (4): pp. 645–659, (2004).
- [5] Boldyš J., Hrach R. : *Thin film description by wavelet coefficients statistics*, *Czechoslovak Journal of Physics*, Vol. 55, No. 1., pp. 55–64, (2005)
- [6] Linchun Wang, D.Y. Li: *Mechanical, electrochemical and tribological properties of nanocrystalline surface of brass produced by sandblasting and annealing*, *Surface and Coatings Technology* Vol. 167, pp. 188–196, (2003)
- [7] Serra, J.: *Image Analysis and Mathematical Morphology*, Academic Press, London (1982).
- [8] Hrach R.; Novotny D.; Novak S.; Pavlik J.: *Morphological study of discontinuous and semicontinuous metal films*, *Vacuum*, Vol. 50, Issues 1–2: 175–178, (1998).
- [9] Bhattacharjee B.: *nth-nearest-neighbor distribution functions of an interacting fluid from the pair correlation function: A hierarchical approach*, *Phys. Rev. E* 67, 041208, (2003).
- [10] Hrach R., Novotný D., Novák S., Pavlík J.: *Computer simulation of semicontinuous and continuous metal film morphology* , *Vacuum*, Vol. 50, Issues 3–4, pp. 289–292 (1998).
- [11] Brostow W. : *Voronoi polyhedra and Delaunay simplexes in the structural analysis of molecular-dynamics-simulated materials*, *Phys. Rev. B* 57, 13448–13458 (1998).
- [12] Jing-Ping Shih, Sheh-Yi Sheu, and Chung-Yuan Mou : *A Voronoi polyhedra analysis of structures of liquid water*, *The Journal of Chemical Physics*, Vol. 100, Issue 3, pp. 2202–2212., (1994).

- [13] R. Y. Yang, R. P. Zou, and A. B. Yu : *Voronoi tessellation of the packing of fine uniform spheres*, Phys. Rev. E 65, Issue 4, 041302 (2002).
- [14] Moučka F., Nezbeda I.: *Detection and characterization of structural changes in the hard-disk fluid under freezing and melting conditions.*, Phys. Rev. Lett. 94(4):040601, (2005)
- [15] Hrach R., Novotny D., Sobotka M., Vicher M., Kostern M. : *Characterisation of degree of arrangement in image analysis of complex systems*, Proc. CCP 2001 Europhysics Conference on Computational Physics, Aachen, Germany 5–8 September 2001, p. B107. ISBN 3-00-008236-0.
- [16] Hrach R.; Simek J.; Kostern M.: *Study of thin film growth by means of computer simulation and image analysis*, Vacuum, Vol. 67, No. 2, 13 September 2002, pp. 229–233, (2002).
- [17] Šíma J., Neruda R.: *Teoretické otázky neuronových sítí*, Matfyzpress, Praha, (1996).
- [18] Byungwhan Kim, Sungmo Kim, Wan-Shick Hong: *Use of Neural Network to Control a Refractive Index of SiN Film Deposited by Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposition*, Plasma Chemistry and Plasma Processing, Vol. 24, No. 1, 200403, pp. 29–40, (2004).