

Тема 11

Радиальные нейронные сети

Equation Section 11 Особое семейство составляют нейронные сети с радиальной активационной функцией (Radial Base Function), радиально меняющиеся вокруг некоторого центра, и принимающие отличные от нуля значения только поблизости этого центра. Как правило, радиальные функции имеют вид

$$j(x) = f(\|x - c\|), \quad (11.1)$$

где c – вектор являющийся центром. Типичный пример такой функции – функция Гаусса, для скалярного аргумента имеющая следующее аналитическое представление:

$$f(x) = \exp\left(-\frac{(x-c)^2}{s}\right). \quad (11.2)$$

Для случая $c=0$ и $s = 1$ график функции изображен на рисунке 11.1.

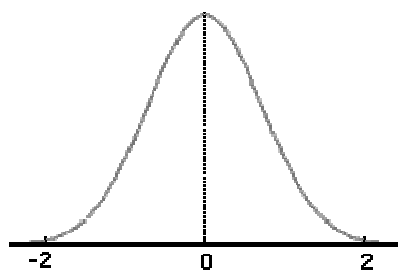


Рис. 11.1. Вид функции Гаусса.

Радиальные нейронные сети осуществляют классификацию по принципам, отличным от тех, что имеют место для сигмоидальных нейронных сетей. Так, сигмоидальный нейрон представляется в многомерном пространстве входных векторов гиперплоскостью, разделяющей это пространство на две части, в зависимости от выполнения одного из условий: либо $\sum_j w_{ij}x_j > 0$, либо $\sum_j w_{ij}x_j < 0$. Этот способ разделения изображен на рисунке 11.2а. Радиальный способ представляет собой разделение векторов в пространстве при помощи гиперсферы вокруг центральной точки. Это позволяет нам применять радиальные нейронные сети в качестве локального аппроксиматора. Этот способ разделения пространства изображен на рисунке 11.2б.

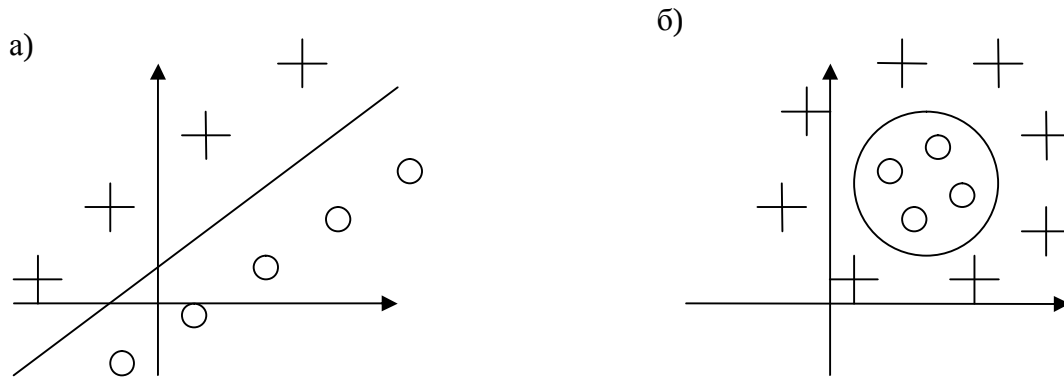


Рис. 11.2. Разделение двумерного пространства:
а) пороговый способ разделения (сигмоидальный нейрон); б)
радиальный способ разделения (радиальный нейрон)

Стандартная радиальная нейронная сеть состоит из трёх слоёв: входной слой, на который подаётся входной сигнал, скрытый слой, состоящий из нейронов радиального типа и выходной слой, осуществляющий взвешенное суммирование результата работы скрытого слоя.

Основанием для определения аппроксимирующих возможностей радиальных нейронных сетей служит теорема Т. Ковера [2] о распознаваемости образов. В этой теореме утверждается, что нелинейные проекции образов в некоторое многомерное пространство могут быть линейно разделены с большой вероятностью, чем при их проекции в пространство с меньшей размерностью.

Для функции $j(x) = (j_1(x), j_2(x), \mathbf{K}, j_m(x))$, заданной на N -мерном пространстве, это пространство является нелинейно j -разделяемым на два пространственных класса X^+ и X^- , если существует вектор весов w , такой что

$$\begin{aligned} \bar{w} j(x) &> 0 \quad x \in X^+, \\ \bar{w} j(x) &< 0 \quad x \in X^-. \end{aligned} \quad (11.3)$$

Таким образом, границу между этими классами можно определить, решив уравнение $\bar{w} j(x) = 0$. Доказано также, что если размерность M вектора $j(x)$ больше или равно количеству разделяемых векторов, то любое множество векторов является j -разделяемым. Применительно к нейросетям это означает, что любая задача классификации многомерных образов решается радиальной НС, если количество нейронов скрытого слоя больше размерности входного вектора, а выходной слой состоит всего

лишь из одного нейрона, осуществляющего взвешенное суммирование с весовыми коэффициентами w_i .

Задача аппроксимации функции радиальной нейронной сетью

На практике, задача разделения множества векторов может быть поставлена как интерполяционная задача, в соответствии с которой необходимо отобразить p различных входных векторов $x^i \in X$ ($i=1,2,\dots,p$) из N -мерного пространства, в множество действительных чисел $d^i \in R$ ($i=1,2,\dots,p$). В соответствии со сказанным выше, для решения этой задачи, мы можем использовать радиальную нейронную сеть скрытый слой которой содержит p радиальных нейронов, выходной слой состоит из взвешенного сумматора, а вся нейронная сеть реализует функцию некоторую функцию $F(x): X \rightarrow R$ такую, что

$$F(x^i) = d^i. \quad (11.4)$$

Однако, зачастую, размер обучающей выборки очень велик, что делает затруднительным подбор параметров нейронной сети содержащей p радиальных нейронов. Поэтому нейронная сеть обычно содержит меньшее число радиальных нейронов, но не слишком малое для осуществления аппроксимации с достаточной точностью. В случае, если в сети будет M базисных функций, то решение ищется в виде

$$F(\bar{x}) = \sum_{i=1}^M w_i j(\|\bar{x} - \bar{c}^i\|), \quad (11.5)$$

Где $M < p$, а $\bar{c}^i$ - центры, которые необходимо определить.

Таким образом, задачу аппроксимации можно сформулировать как задачу подбора количества радиальных функций, а также поиск значений настраиваемых параметров сети, при которых решение уравнения (11.5) было бы наиболее точным.

Архитектура радиальной нейронной сети

Обобщённая структура радиальной нейронной сети представлена на рисунке 11.3.

В качестве радиальной функции часто используется функция Гаусса. В векторной форме она может быть определена как

$$j(\bar{x}) = j(\|\bar{x} - \bar{c}^i\|) = \exp\left(-\frac{\|\bar{x} - \bar{c}^i\|^2}{2s_i^2}\right), \quad (11.6)$$

Где $\bar{c}^i$ - искомый приближенный центр, а s_i - параметр, от которого зависит ширина (крутизна спуска) функции.

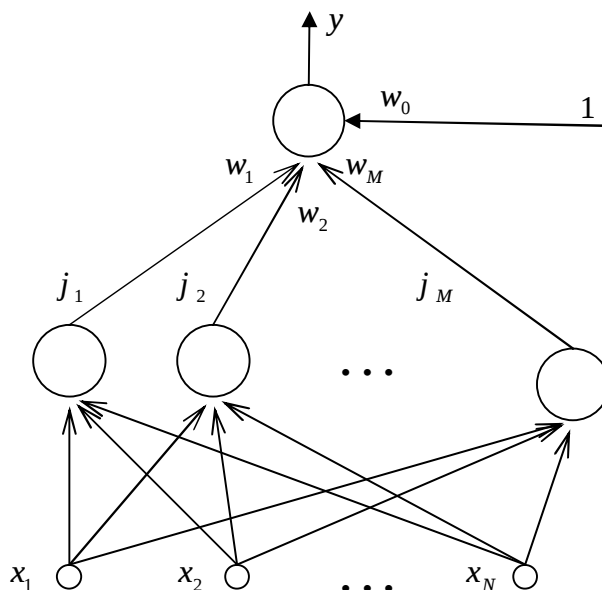


Рис. 11.3. Общая структура радиальной нейронной сети.

Можно также модифицировать искомую функцию, приняв во внимание, что она может иметь различный масштаб по каждой оси пространства входных векторов. Для этого, необходимо перейти от евклидовой метрики $\|\bullet\|$ к масштабированной метрике, путём добавления квадратной матрицы коэффициентов Q , размерности $N \times N$:

$$\|\bar{x}\|_Q^2 = (\bar{x}Q)^T (Q\bar{x}^T) = \bar{x}Q^T Q\bar{x}^T. \quad (11.7)$$

Функция (11.6) в этом случае примет вид:

$$\begin{aligned} j(\bar{x}) &= j(\|\bar{x} - \bar{c}^i\|_{Q^i}) = \exp(-(\bar{x} - \bar{c}^i)(Q^i)^T Q^i (\bar{x} - \bar{c}^i)^T) = \\ &= \exp\left(-\frac{1}{2}(\bar{x} - \bar{c}^i)C^i (\bar{x} - \bar{c}^i)^T\right), \end{aligned} \quad (11.8)$$

где матрица $\frac{1}{2}C^i = (Q^i)^T Q^i$ играет ту же роль, что и скалярный коэффициент $\frac{1}{2}s_i^2$ в формуле (11.6).

Нейронная сеть с масштабированной метрикой Евклида имеет лучшие аппроксимирующие возможности и называется Гипер Радиальная Нейронная Сеть (англ. Hyper Radial Basis Function).

Очевидно, что если масштабирующая матрица имеет диагональную форму, то формула (11.6) эквивалентна формуле (11.8).

Методы обучения радиальных нейронных сетей

Задача обучения радиальной сети ставится как задача аппроксимации некоторой функции $g: X \rightarrow Y$, которая задана обучающей выборкой $(\bar{x}^k, \bar{d}^k)$, $k = 1, 2, \mathbf{K}, p$.

Как правило, процесс обучения радиальной нейронной сети состоит из двух этапов:

1. поиск весов нейрона выходного слоя;
2. подбор центров $\bar{c}^i$ и весовых матриц Q^i для базисных функций $j_1, j_2, \mathbf{K}, j_M$.

Каждый из этапов обучения проводится при фиксированных значениях параметров сети, модифицируемых на другом этапе, поэтому, можно рассматривать различные комбинации использования алгоритмов поиска для разных этапов.

Гибридный алгоритм обучения

На начальном этапе случайным образом инициализируются искомые параметры сети. Далее, попеременно идут первый и второй этапы.

1. На первом этапе, величины центров и весов базисных функций полагаются фиксированными, что позволяет задачу поиска весов w_i выходного слоя сформулировать, как задачу поиска решения системы линейных уравнений, которая в матричной форме записи выглядит так:

$$\begin{pmatrix} 1 & j_1(\bar{x}^1) & j_2(\bar{x}^1) & \mathbf{K} & j_M(\bar{x}^1) \\ 1 & j_1(\bar{x}^2) & j_2(\bar{x}^2) & \mathbf{K} & j_M(\bar{x}^2) \\ \mathbf{K} & \mathbf{K} & \mathbf{K} & \mathbf{K} & \mathbf{K} \\ 1 & j_1(\bar{x}^p) & j_2(\bar{x}^p) & \mathbf{K} & j_M(\bar{x}^p) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} w_0 \\ w_1 \\ \mathbf{K} \\ w_M \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \mathbf{K} \\ d_p \end{pmatrix} \quad (11.9)$$

или, в компактной форме

$$G\bar{w}^T = \bar{d}^T. \quad (11.10)$$

Здесь, $\bar{d} = (d_1, d_2, \mathbf{K}, d_p)$ - вектор ожидаемых значений.

Система (11.9) может быть решена за один шаг с использованием метода псевдоинверсии матрицы G :

$$\bar{w} = G^+ \bar{d}^T, \quad (11.11)$$

которое производится путём применения декомпозиции SVD.

Ниже изложено сокращенное описание метода, так как оно описано в [1]. Псевдоинверсия матрицы G рассчитывается с использованием разложения по собственным значениям, так что

$$G = USV^T. \quad (11.12)$$

Матрицы U и V ортогональны и имеют размерности $(p \times p)$, $(M \times M)$ соответственно, тогда как S - это псевдодиагональная матрица с размерностью $(p \times M)$.

При этом $M < p$, а диагональные элементы $s_1 \geq s_2 \geq \mathbf{K} \geq s_M \geq 0$. Допустим, что только r первых элементов s_i имеют значимую величину, а остальными можно пренебречь. Тогда количество столбцов ортогональных матриц U и V может быть уменьшено до r . Полученные таким образом редуцированные матрицы U_r и V_r имеют вид:

$$U_r = [u_1 u_2 \mathbf{L} u_r],$$

$$V_r = [v_1 v_2 \mathbf{L} v_r],$$

а матрица $S_r = \text{diag}[s_1, s_2, \mathbf{K}, s_r]$ становится полностью диагональной (квадратной).

Псевдообратная к G матрица определяется в этом случае выражением

$$G^+ = V_r S_r^{-1} U_r^T, \quad (11.13)$$

в котором $S_r^{-1} = [1/s_1, 1/s_2, \mathbf{K}, 1/s_r]$, а вектор весов в сети, подвергающейся обучению, задаётся формулой

$$\bar{w} = V_r S_r^{-1} U_r^T \bar{d}^T. \quad (11.14)$$

2. На втором этапе одним из градиентных методов осуществляется поиск параметров скрытого слоя радиальных нейронов. Для этого необходимо сначала вычислить выход сети для последовательности входных векторов. Рассчитать погрешность результата, по которой далее рассчитывается вектор градиента функции ошибки относительно центров c_j^i и коэффициентов Q_{kj}^i (s_{ij} в случае диагональности матрицы Q_{kj}^i).

Радиальная функция для i -го нейрона на k -м входном векторе обучающей выборки будет рассчитываться в соответствии с формулой

$$j_i(\bar{x}^k) = \exp \left(-\frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \left(\frac{x_j^k - c_j^i}{s_{ij}} \right)^2 \right). \quad (11.15)$$

Функцию ошибки можно задать в виде

$$E = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^p (y^k - d^k)^2 = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^p \left(\sum_{i=0}^M w_i j_i(\bar{x}^k) - d^k \right)^2. \quad (11.16)$$

Дифференцируя эту функцию, получаем:

$$\frac{\partial E}{\partial c_j^i} = \sum_{k=1}^p \left((y^k - d^k) \cdot w_i \cdot u_{ik} \cdot \frac{(x_j^k - c_j^i)}{s_{ij}^2} \right), \quad (11.17)$$

$$\frac{\partial E}{\partial s_{ij}} = \sum_{k=1}^p \left((y^k - d^k) \cdot w_i \cdot u_{ik} \cdot \frac{(x_j^k - c_j^i)^2}{s_{ij}^3} \right), \quad (11.18)$$

где

$$u_{ik} = \exp \left(-\frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \left(\frac{x_j^k - c_j^i}{s_{ij}} \right)^2 \right). \quad (11.19)$$

Далее вычисляются новые значения центров и ширин функций по формулам:

$$c_j^i(n+1) = c_j^i(n) - l(n) \frac{\partial E}{\partial c_j^i}, \quad (11.20)$$

$$s_{ij}(n+1) = s_{ij}(n) - l(n) \frac{\partial E}{\partial s_{ij}}. \quad (11.21)$$

В этих формулах $l(n)$ - коэффициент скорости обучения на шаге обучения n .

Многократное повторение этих этапов ведёт к полному обучению нейронной сети.

Градиентный алгоритм обучения

Градиентные алгоритмы обучения радиальной сети отличаются от гибридного тем, что в градиентном алгоритме вычисляются поправки к весам нейрона выходного слоя и осуществляется их коррекция, в отличие от прямого расчёта значений весов при решении системы линейных уравнений (11.9) с помощью формул псевдоинверсии (11.14). Так, частные производные функции E по значениям w_i рассчитываются по формулам:

$$\frac{\partial E}{\partial w_0} = y^k - d^k, \quad (11.22)$$

$$\frac{\partial E}{\partial w_i} = \exp \left(-\frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \left(\frac{x_j^k - c_j^i}{s_{ij}} \right)^2 \right) \cdot (y^k - d^k). \quad (11.23)$$

А изменение параметров выходного слоя производится по формуле:

$$w_i(n+1) = w_i(n) - l(n) \frac{\partial E}{\partial w_i}. \quad (11.24)$$

Имея частные производные по всем параметрам функции ошибки можно использовать любой градиентный метод обучения.

Большой проблемой в градиентных методах обучения радиальной сети является подбор начальных параметров, поэтому для их инициализации, как правило, используются алгоритмы самоорганизации.

Сравнение радиальных и сигмоидальных сетей

Радиальные нейронные сети отличаются от сигмоидальных (например, многослойных персептронов) более простым отображением моделируемой задачи. Сигмоидальная НС, в силу вида функции активации более приспособлена для глобальной аппроксимации некоторой функции. Радиальная НС более приспособлена для локальных аппроксимаций, т. е. аппроксимаций лишь в некоторых сферах области определения искомой функции. В связи с этим, очевидно, радиальные НС имеют немного худшие обобщающие способности, особенно на границах области заданной обучающей выборкой. Однако локальность области определения для радиальных НС позволяет более точно определить исходные данные и, как следствие, существенно упростить и ускорить обучение НС. Особенно это касается тех задач, для которых целевая функция имеет сложную структуру, с трудноопределяемыми начальными значениями алгоритма.

Очевидно что, например, функции гауссовского типа, принимающие ненулевые значения только в зоне около определённого центра, позволяют легко установить зависимость между параметрами базисных функций и размещением обучающих данных в многомерном пространстве.

Всё это позволяет считать, что радиальные нейронные сети лучше, чем сигмоидальные, решают задачи классификации, задачи диагностики, задачи распознавания образов и т. п.

Важное достоинство радиальных НС – более простой алгоритм обучения. При наличии только одного скрытого слоя и тесной связи активности нейрона с соответствующей областью пространства обучающих данных точка обучения оказывается гораздо ближе к оптимальному решению, чем это имеет место в многослойных сетях. Выигрыш также существенен на таком этапе конструирования (обучения) сети, как подбор архитектуры. Для радиальных сетей формирование оптимальной структуры сети оказывается естественным этапом процесса обучения, не требующим никаких дополнительных усилий.

Литература

1. Осовский С. Нейронные сети для обработки информации. – М.: «Финансы и статистика», 2004.
2. Cover T. Geometrical and statistical properties of systems of linear inequalities with applications in pattern recognition // IEE Trans. Electronic Computers. 1965. – Vol. 14. – Pp. 326-334.
3. Тархов Д. А. Нейронные сети. Модели и алгоритмы. Кн. 18. – М.: Радиотехника, 2005.