УДК 519.7

ПРИМЕНЕНИЕ ИНТЕГРАЛА ВИНЕРА К ОПИСАНИЮ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ

П. А. Головинский

Воронежский государственный архитектурно-строительный университет

Рассмотрены большие искусственные нейронные сети прямого распространения. Установлено, что распространение дифференциального сигнала, а также обучение в таких сетях описываются с помощью интеграла Винера. Обнаружена связь полученной математической модели с цепями Маркова и задачей о случайном блуждании. Для непрерывных параметров настройки сети получено описание ее динамики в форме уравнений Колмогорова—Феллера.

1. ВВЕДЕНИЕ

В теории искусственных нейронных сетей в настоящее время существует целый ряд достаточно хорошо изученных структур [1, 2]. К ним следует отнести в первую очередь сети прямого распространения, сети Хопфилда и Хемминга, сети Кохонена, сети двунаправленной ассоциативной памяти и адаптивные резонансные сети. При этом сети прямого распространения выделяются как своей простотой, так и возможностью реализации высокоэффективного метода настройки параметров-весов входов нейронов методом обратного распространения ошибки. Если ставится задача аппроксимации свойств системы с медленно и плавно меняющимися, но неизвестными внутренними параметрами и функциональными связями, то перенастройка используемой для этого искусственной нейронной сети может обеспечиваться на каждом шаге малой коррекцией параметров. Коррекция осуществляется путем сравнения сигнала выходного слоя нейронов с предъявляемыми данными описываемой системы при одинаковых входах у моделируемой системы, и искусственной сети нейронов. Соответствующие формулы для вычисления ошибки и коррекции весов нейронов во всех слоях хорошо известны [2].

Недостатком описания, имеющегося в настоящее время в распоряжении исследователей, с точки зрения возможности общего анализа функционирования нейронных сетей, является сочетание в формулах для распространение сигнала и обучения одновременно гладких операций дифференцирования и дискретных операций суммирования по большому числу элементов. Целью настоящей работы является установление связи описания больших и сверхбольших сетей прямого распространения с цепями Маркова, а также методом интегрирования по траекториям, то есть с интегралом Винера. Такая связь открывает возможность использования мощного аппарата теории случайных процессов и непрерывных групп для дальнейшего анализа динамики искусственных нейронных сетей.

2. МЕТОД ОБРАТНОГО РАСПРОСТРАНЕНИЯ ОШИБКИ

Рассмотрим непрерывный аналог метода обратного распространения ошибки. Начнем с изменения выходного сигнала при малом изменении входного сигнала в сети. Вывод основных соотношений мы проделаем на примере двухслойной нейронной сети. Будем считать, что каждый нейрон i обладает функцией активации одного и того же вида

$$f = f(s_i), \tag{1}$$

где аргумент

$$s_i = \sum_{j=1}^{N} w_{ij} x_j, \tag{2}$$

w_{ij} — веса, описывающие связи i-го нейрона с j-ми входами, x_j — значение сигнала на j-ом входе. Для определенности можно считать функцию активации сигмоидальной с диапазоном изменения значений [0,1]. Основу алгоритма составляет расчет целевой функции как квадратичной функции разностей между фактическими значениями $x_k^{(3)}$ на выходе сети и ожидаемыми значениями d_k выходных сигналов сети.

При переходе от дискретных переменных к непрерывным переменным суммирование по индексам, нумерующим входы и выходы нейронов, заменяется на интегрирование. Нумерацию слоев будем осуществлять переменной u_n с индексом, указывающим номер слоя. Пусть изменение величины u_n происходит с фиксированным дискретным шагом $u_n - u_{n-1} = \varepsilon$. Нейроны в слое с номером n занумеруем переменной $z_n \in [0,l]$, а веса связи двух нейронов из слоя u_{n-1} и слоя u_n будем описывать коэффициентами $w(z_n, u_n; z_{n-1}, u_{n-1})$. Запишем стандартную целевую функцию с помощью непрерывных переменных:

$$E = \frac{1}{2}\int_0^l (x(z_3,u_3) - d(z_3))^2 dz_3. \qquad (3)$$

Для двухслойной сети полное выражение для целевой функции будет иметь вид

$$E = \frac{1}{2}\int_0^l \left\{ d(z_3) - f\left[\int_0^l w(z_3,u_3;z_2,u_2)\times \right.\right.$$
$$\left.\left. \times f\left(\int_0^l w(z_2,u_2;z_1,u_1)\,x(z_1,u_1)\,dz_1\right)\right] dz_2 \right\}^2 dz_3. \qquad (4)$$

Пусть начальное входное значение сети нулевое и ему соответствует нулевой выход, а $x(z_1)$ является малым изменением входного значения. Нулевых начальных значений всегда можно добиться простой заменой переменных. Тогда значение сети на выходе составит

$$x(z_3) = f\left[\int_0^l w(z_3,u_3;z_2,u_2)\times \right.$$
$$\left. \times f\left(\int_0^l w(z_2,u_2;z_1,u_1)\,x(z_1)\,dz_1\right)\right] dz_2 \approx$$
$$\approx \frac{df(s^{(2)})}{ds^{(2)}}\int_0^l w(z_3,u_3;z_2,u_2)\frac{df(s^{(1)})}{ds^{(1)}}\times$$
$$\times \int_0^l w(z_2,u_2;z_1,u_1)\,x(z_1)\,dz_1 dz_2. \qquad (5)$$

Если в сети насчитывается не два, а n слоев, то сигнал на выходе будет

$$x(z_{n+1},u_{n+1}) =$$
$$= \frac{df(s^{(n)})}{ds^{(n)}}\int_0^l w(z_{n+1},u_{n+1};z_n,u_n)\frac{df(s^{(n-1)})}{ds^{(n-1)}}\times$$
$$\times \int_0^l w(z_n,u_n;z_{n-1},u_{n-1})\ldots \qquad (6)$$
$$\frac{df(s^{(1)})}{ds^{(1)}}\int_0^l w(z_2,u_2;z_1,u_1)\,x(z_1,u_1)\,dz_1 dz_2\ldots dz_n.$$

Подобные выражения хорошо известны в теории случайных процессов и возникают при описании цепей Маркова. В пределе бесконечно большого числа слоев, когда шаг $\varepsilon \to 0$ выражение (6) переходит в интеграл по траекториям или как его еще иначе называют — функциональный интеграл или интеграл Винера [3, 4]. В теории цепей Маркова и теории броуновского движения величина $w(z_i,u_i;z_{i-1},u_{i-1})$ означает вероятность перехода из точки с координатой z_{i-1} в слое, задаваемом параметром u_{i-1}, в точку с координатой z_i в следующем слое с параметром u_i. Введем определение

$$\frac{df}{ds} = \exp(-\varepsilon V(z)). \qquad (7)$$

Тогда

$$G(z,u;z_1,u_1) = E\exp\left[-\int_0^l V(z(u))du\right] \qquad (8)$$

представляет собой функцию распространения или функцию Грина в форме интеграла Винера [4], а соотношение (6) можно записать в виде

$$x(z,u) = \int_0^1 G(z,u;z_1,u_1)x(z_1,u_1)dz_1. \qquad (9)$$

Формула (7) содержит определенное ограничение, требующее пояснений. Функция df/ds характеризует крутизну наклона функции активации нейрона. Если в нейронной сети содержится конечное число слоев, как это всегда и есть на самом деле, то при вычислении по формуле (6) произойдет перемножение таких коэффициентов наклона, приводящее к конечной величине произведения. В пределе бесконечного числа слоев можно получить, вообще говоря, самые разные результаты, в том числе возможно и отсутствие конечного предела.

Мы ограничимся рассмотрением предельных сетей с конечным значением полного отклика. При использовании сигмоидальной функции активации, значения которой меняются в интервале $[0,1]$, при большой крутизне этой функции она будет близка к ступенчатому скачку, а ее производная будет стремиться к δ-функции. Такая зависимость для производной может быть представлена приближенно в духе метода Лапласа и метода перевала в виде гауссовой функции малой ширины:

$$\frac{df}{ds} = \frac{2}{\sqrt{\pi}s_0}\exp\left(-\frac{s^2}{s_0^2}\right). \qquad (10)$$

Параметр s_0 характеризует крутизну функции активации и равен полуширине области перехода от минимального значения функции 0 к ее максимальному значению 1. Отмеченное свойство может быть полезно при проведении конкретных вычислений. Фактически появление в функциональном интеграле производной от функции активации означает переход к другому типу сети — нейронной сети с радиальными базисными функциями. Таким образом, между сетями с сигмоидальными и радиальными функциями активации нейронов возникает весьма простая связь. Описание малых изменений в сети с сигмоидальным характером функции активации приводит к эквивалентной нейронной сети с радиальными функциями активации.

Теперь обратимся к установлению уравнений для непрерывного предела метода обратного распространения ошибки. Здесь удобнее рассматривать не производные, а вариации исходных функционалов как функции вариации параметров настройки. Для двухслойной сети формулы для корректировки весов принимают в выходном слое вид:

$$\Delta w(z_3,u_3;z_2,u_2) = = -\eta\left[x(z_3,u_3)-d(z_3)\right]\frac{df(s(z_2,u_2))}{ds(z_2,u_2)}x(z_2,u_2), \tag{11}$$

а для скрытого слоя

$$\Delta w(z_2,u_2;z_1,u_1) = = -\eta\int_0^l dz_3\left[x(z_3,u_3)-d(z_3)\right]\frac{df(s(z_3,u_3))}{ds(z_3,u_3)}\times w(z_3,u_3;z_2,u_2)\frac{df(s(z_1,u_1))}{ds(z_1,u_1)}x(z_1,u_1). \tag{12}$$

Если скрытых слоев много, то поправку к весам первого слоя можно записать в виде

$$\Delta w(z_2,u_2;z_1,u_1) = = -\eta\int_0^l dz_3\left[x(z_3,u_3)-d(z_3)\right]\times G(z_3,u_3;z_2,u_2)\frac{df(s(z_1,u_1))}{ds(z_1,u_1)}x(z_1,u_1). \tag{13}$$

Выражения (9) и (13) весьма похожи по структуре, поскольку и величина сигнала, передаваемого от одного слоя к другому, и веса, с которыми учитываются эти сигналы, входят в аргумент функции активации в виде фактически одной и той же линейной комбинации (2). Соответственно, при дифференцировании сложной функции отклика нейронной сети проявляется тот факт, что все промежуточные скрытые слои нейронов реагируют одинаково на изменение аргументов s в каждом слое независимо от того, вызвано ли оно изменением входного сигнала, или вариацией синаптических весов.

3. ДИФФУЗИОННОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ

Из предыдущего рассмотрения видно, что как для прямого распространения сигнала, так и для обратного распространения ошибки, важна одна и та же функция Грина нейронной сети $G(z,u;z_1,u_1)$, поэтому стоит рассмотреть ее свойства несколько подробнее. Формально-математически рассматриваемая нами цепь Маркова эквивалентна некоторому диффузионному процессу вдоль координаты z, в котором роль времени играет переменная u. Такому процессу можно поставить в соответствие уравнение Колмогорова—Феллера [5]. Для получения соответствующего уравнения заметим, что функция Грина G удовлетворяет условию

$$G(z,u;z_1,u_1) = = \int_0^l G(z,u;z_2,u_2)G(z_2,u_2;z_1,u_1)dz_2. \tag{14}$$

Обозначим

$$\begin{aligned} a(z,u) &= = \lim_{\Delta\to 0}\frac{1}{\Delta}\int_0^l (z_1-z)G(z_1,u;z,u-\Delta)dz_1, \\ b(z,u) &= = \lim_{\Delta\to 0}\frac{1}{\Delta}\int_0^l (z_1-z)^2\,G(z_1,u;z,u-\Delta)dz_1 \quad . \end{aligned} \tag{15}$$

В терминах диффузионного процесса коэффициент $a(z,u)$ означает скорость направленного движения частиц, а коэффициент $b(z,u)$ определяет скорость изменения квадрата расстояния от точки нахождения частицы в данный момент, в то время как сам квадрат расстояния в диффузионном процессе растет пропорционально времени в силу случайного характера блуждания частицы.

Хотя обычный диффузионный процесс для распределения сигнала в нейронной сети является не более чем аналогией, это позволяет использовать интуитивно понятные и наглядные образы броуновского движения, в то время как для распространения сигналов в нейронной сети от слоя к слою такой наглядной картины нет. Кроме того, можно представить распространение сигнала в нейронной сети непосредственно как диффузионный процесс, если считать, что сигнал передается от слоя к слою с характерным временем срабатывания ε в каждом слое.

В теории вероятностей показано, что функция $G(z,u;z_1,u_1)$ удовлетворяет обратному уравнению Колмогорова—Феллера

$$\frac{\partial G}{\partial u}=\frac{1}{2}\frac{\partial^2(aG)}{\partial z^2}-\frac{\partial(bG)}{\partial z} \tag{16}$$

с начальным условием при $u=u_1$ в виде

$$G(z,u;z_1,u)=\delta(z-z_1), \tag{17}$$

означающем, что в начальном слое нейронов возбуждена только одна связь в точке с координатой z_1. Переопределение основных уравнений (9), (13) в форме дифференциальных уравнений в частных производных позволяет использовать их известные свойства и решения.

4. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ И ВЫВОДЫ

Мы рассмотрели возмущения в нейронных сетях прямого распространения. Отметим, что возмущение произвольных дискретных марковских процессов вне связи с нейронными сетями довольно подробно рассмотрено в [6]. Сформулированные нами уравнения описывают нейронные сети прямого распространения в приближении непрерывного поля сигналов и весов.

Достаточно ясный смысл приближение непрерывного поля имеет при плавном изменении параметров сети в каждом слое. Использование таких ограничений требует дополнительного обсуждения и исследования. В случае более сложных разрывных зависимостей подход, основанный на функциональном интегрировании, остается в силе, в то время как возможность перехода к дифференциальному уравнению Колмогорова—Феллера утрачивается. Описание распространения сигнала в такой сети с сильными скачкообразными изменениями передаточных функций также представляет несомненный интерес, особенно при использовании управления сдвигом значений аргументов передаточных функций нейронов.

Развитый в работе формализм относится к классическим нейронным сетям, но аналогичным образом можно описать и квантовые нейронные сети [7, 8]. При этом обычное скалярное произведение следует заменить на квантовые проекции, а выход нейрона будет описываться не числом, а волной с определенной амплитудой и частотой. Рассмотрение таких систем является предметом дальнейших исследований.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Осовский С.* Нейронные сети для обработки сигналов. М.: Финансы и статистика, 2002.

2. *Круглов В.В., Борисов В.В.* Искусственные нейронные сети. М.: Горячая линия — Телеком, 2001.

3. *Фейнман Р.* Статистическая механика. М.: Мир, 1978.

4. *Кац М.* Вероятность и смежные вопросы в физике. М.: УРСС, 2003.

5. *Феллер В.* Введение в теорию вероятностей и ее приложения. М.: Мир, 1984. Т. 2.

6. *Xi-Ren Cao, Han-Fu Chen.* Perturbation realization, potentials, and sensitivity analysis of Markov processes // IEEE Transactions on Automatic Control. 1997. V. 42. № 10. P. 1382—1393.

7. *Miranker W.L.* Path integrals of information // Yale Univ. DCS/TR-1215, 2000.

8. *Miranker W.L.* Interference effects in computation // SIAM Review. 1997. V. 39. P. 630—643.