

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ТЕНЗОРА КРИВИЗНЫ ДЛЯ ВЫБОРА ЧИСЛА НЕЙРОНОВ И НАЧАЛЬНЫХ УСЛОВИЙ ОБУЧЕНИЯ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ

Н. А. Тюкачев

Воронежский государственный университет

Задача обучения нейронной сети осложняется тем, что критерий как функция параметров обладает локальными минимумами, плоскими или пологими плато и узкими оврагами. Практика показывает, что критерий существенно зависит от параметра функции отклика. Поэтому этот параметр включен в число минимизирующих параметров.

Параметры нейросети, главным образом первого слоя, определяют топологию искомой поверхности, т. е. определяют области выпуклости, вогнутости, седловые участки. Для n -мерного случая необходимо рассматривать такие понятия как тензор кривизны и индексы точек. Нейроны первого слоя определяют число и вид областей различных индексов, а каждый нейрон по каждой паре параметров соответствует прямой на плоскости этих параметров.

В работе описан проект, позволяющий выполнять следующие функции: создавать нейронную сеть с любым количеством входов, слоев и нейронов; выбирать в качестве источника обучения любую функцию или импортировать таблично заданные обучающие серии; выбирать одну из 11-ти функций отклика; графически подбирать топологию поверхности, меняя параметры первого слоя; обучать нейросеть методом скорейшего спуска; изображать обучающую поверхность, выходную поверхность нейросети, поверхность гауссовой кривизны, поверхность критерия в зависимости от любых двух параметров.

Область применения нейронных сетей достаточно широка. Обучив нейросеть на исторических примерах, можно использовать ее для прогнозирования ситуации в будущем. Можно экспериментировать на нейросети и заранее определить, как повлияет на результат изменения того или иного параметра, а, следовательно, подобрать наиболее оптимальные показатели. Нейросети интенсивно используются на фондовых и валютных рынках и доказали свою высокую эффективность и способность качественно определять направление движения рынка, скорость изменения цен. С задачей очистки данных сталкиваются многие при создании хранилищ данных и CRM систем. В связи с тем, что данные в информационные системы поступают из разнородных источников, возникают проблемы связанные с противоречивостью сведений, определением степени доверия той или иной информации, ошибками при наборе данных, опечатками. Нейросети в состоянии обнаружить факты фальсификаций даже при больших объемах операций, основываясь на нахождении случаев нетипичного поведения. Эти механизмы

можно применять в таких областях, как страхование, работа с кредитными карточками, защита локальных сетей и многих других. Способность нейросетей обучаться на примерах полезна для управления динамическими системами. Одна из классических задач, решаемых при помощи нейронных сетей, — распознавание образов и идентификация объектов.

В основе искусственной нейронной сети лежит элемент — персептронный нейрон. Математическая модель персептронного нейрона представляет собой элемент, который имеет несколько входов и один выход. Структурная модель нейрона показана на рис. 1.

На вход j -го нейрона подается вектор x_j . Эти значения суммируются с весами w_{ij} , и к результату прибавляется постоянное значение смещения b_j . В результате получается некоторая величина u_j :

$$u_i = \sum_{j=1}^N w_{ij} x_j + b_i. \quad (1)$$

к которой применяется функция активации $\eta(u_j)$. Часто эту функцию называют передаточной функцией или функцией отклика. На выходе нейрона получается значение

$$y_j = \eta(u_j). \quad (2)$$

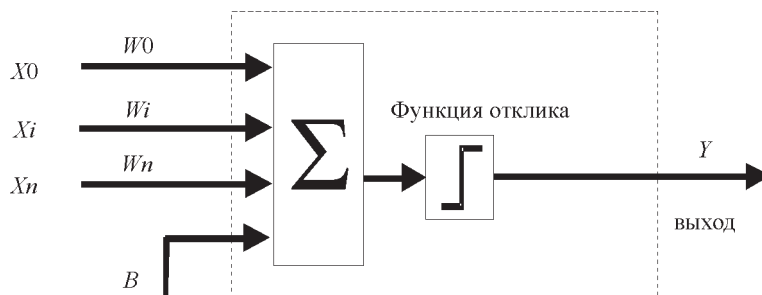


Рис. 1. Модель персептронного нейрона

Многослойная сеть с последовательными связями представляет собой набор слоев ($s = 0 \dots L_s - 1$), в каждом из которых может быть N_s нейронов. На рис. 2 представлена двухслойная сеть с последовательными связями.

Широко используются и в литературе [1–5, 7–14] описаны сети не только с последовательными связями, но и с более сложной структурой. Однако в этой работе они не рассматриваются.

Для большинства задач достаточно использовать двух- и трехслойные сети, для которых выходные значения вычисляются по формулам (3) и (4):

$$y_{k,1} = \eta \left(b_{k,1} + \sum_{i=0}^{N_1-1} w_{ik,1} \eta \left(b_{i,0} + \sum_{j=0}^{N_0-1} w_{ji,0} x_j \right) \right); \quad (3)$$

$$y_{m,1} = \eta \left(b_{m,2} + \sum_{j=0}^{N_2-1} w_{km,2} \eta \times \right. \\ \left. \times \left(b_{k,1} + \sum_{i=0}^{N_1-1} w_{ik,1} \eta \left(b_{i,0} + \sum_{j=0}^{N_0-1} w_{ji,0} x_j \right) \right) \right). \quad (4)$$

В общем случае выходные значения для слоя с номером s вычисляются по итерационной формуле

$$y_{m,s} = \eta \left(b_{m,s} + \sum_{k=0}^{N_s-1} w_{km,s} y_{k,s-1} \right). \quad (5)$$

В качестве функции отклика чаще всего используются следующие (см. табл. 1).

Для определения параметров b_q и w_{pq} предлагается минимизировать критерий E , представляющий собой сумму квадратов отклонений значений, вычисленных с помощью нейросети y^Ω , от истинных значений d^Ω :

$$E = \frac{1}{2} \sum_{\Omega} (y^\Omega - d^\Omega)^2. \quad (6)$$

Процесс минимизации критерия E называется обучением нейронной сети. Для решения задачи обучения используются следующие итерационные алгоритмы:

— алгоритмы локальной оптимизации с вычислением частных производных первого порядка (градиентный алгоритм обратного распространения, метод скорейшего спуска, методы одномерной и двумерной оптимизации в направлении антиградиента, методы, учитывающие направление антиградиента на нескольких шагах алгоритма, метод сопряженных градиентов);

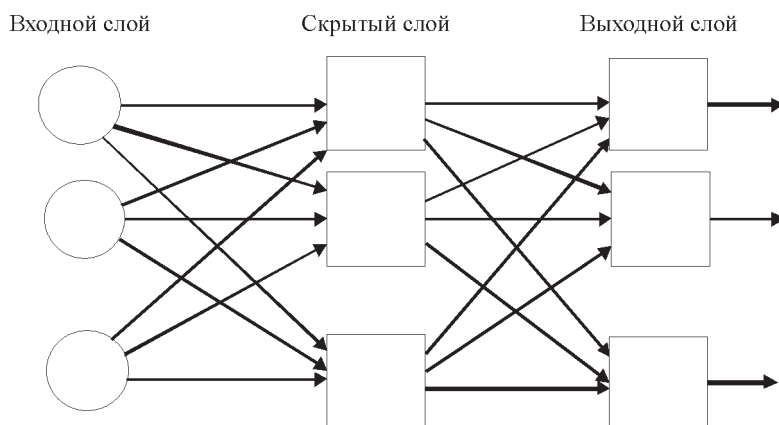


Рис. 2. Двухслойная сеть с последовательными связями

Таблица 1

Функции отклика

Название	Формула	Область значений
Пороговая	$\eta(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ 1, & x \geq 0 \end{cases}$	(0,1)
Знаковая, сигнатурная	$\eta(x) = \begin{cases} -1, & x < 0 \\ 1, & x \geq 0 \end{cases}$	(-1,1)
Сигмоидальная, логическая	$\eta(x) = \frac{1}{e^{-\beta x} + 1}$	(0,1)
Полулинейная	$\eta(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ x, & x \geq 0 \end{cases}$	(0,∞)
Линейная	$\eta(x) = x$	(-∞,∞)
Функция Гаусса	$\eta(x) = e^{-\beta x^2}$	(0,1)
Полулинейная с насыщением	$\eta(x) = \begin{cases} 0, & x \leq 0 \\ x, & 0 < x < 1 \\ 1, & x \geq 1 \end{cases}$	(0,1)
Линейная с насыщением	$\eta(x) = \begin{cases} -1, & x \leq -1 \\ x, & -1 < x < 1 \\ 1, & x \geq 1 \end{cases}$	(-1,1)
Гиперболический тангенс, сигмоидальная	$\eta(x) = \frac{e^{\beta x} - e^{-\beta x}}{e^{\beta x} + e^{-\beta x}}$	(-1,1)
Треугольники	$\eta(x) = \begin{cases} 1 - x , & x \leq 1 \\ 0, & x > 1 \end{cases}$	(0,1)
sin	$\eta(x) = \begin{cases} 0, & x \leq -\frac{\pi}{2\beta} \\ \frac{1}{2}(1 + \sin(\beta x)), & -\frac{\pi}{2\beta} < x < \frac{\pi}{2\beta} \\ 1, & x \geq \frac{\pi}{2\beta} \end{cases}$	(0,1)

— алгоритмы локальной оптимизации с вычислением частных производных первого и второго порядка (метод Ньютона, методы оптимизации с разреженными матрицами Гессе, квазиньютоновские методы, метод Гаусса-Ньютона и др.);

— стохастические методы оптимизации (поиск в случайном направлении, имитация отжига, метод Монте-Карло);

— алгоритмы глобальной оптимизации (перебором значений параметров, от которых зависит целевая функция).

Одним из самых эффективных и обоснованных методов обучения нейронных сетей является *алгоритм обратного распространения*

ошибки, который применим только к односторонним многослойным сетям. В алгоритме обратного распространения ошибки сначала происходит коррекция весов для выходного нейрона, а затем для нейронов скрытых слоев.

Другим эффективным методом, который мы будем использовать, является *метод скорейшего спуска*. В этом методе приращение параметра вычисляется по формуле

$$\Delta a_q \approx -\tau e^{-\sigma L} \frac{\partial E}{\partial a_q}, \quad (7)$$

где τ — малый шаг, σ — малый параметр, отвечающий за уменьшение шага в зависимости от номера итерации L .

Градиент от критерия по любому параметру a_q вычисляется по формуле

$$\frac{\partial E}{\partial a_q} = \sum_{\Omega} (y^{\Omega} - d^{\Omega}) \frac{\partial y^{\Omega}}{\partial a_q}. \quad (8)$$

Для вычисления градиента критерия необходимо вычислить градиент от вектора выхода. В частности, градиент от вектора выхода для параметров первого слоя двухслойной сети равен:

$$\frac{\partial y_k}{\partial b_{q,0}} = \eta'(u_{k,1}) w_{qk,1} \eta'(u_{q,0}), \quad (9)$$

$$\frac{\partial y_k}{\partial w_{lq,0}} = \eta'(u_{k,1}) w_{qk,1} \eta'(u_{q,0}) x_l. \quad (10)$$

Формулы (11) и (12) позволяют вычислить градиент от вектора выхода по параметрам b_{qs} , w_{qps} для второго слоя:

$$\frac{\partial y_k}{\partial b_{q,1}} = \eta'(u_{k,1}); \quad (11)$$

$$\frac{\partial y_k}{\partial w_{lq,1}} = \eta'(u_{k,1}) \eta(u_{l,0}) \delta_{qk}. \quad (12)$$

Обычно параметр функции отклика β при оптимизации не рассматривается. Однако практика показывает, что критерий существенно зависит и от этого параметра. Поэтому включим β в число минимизирующих параметров, производная по которому вычисляется по формуле

$$\frac{\partial y_k}{\partial \beta} = \eta'(u_{k,1}) \times \left(u_{kl,1} + \beta \sum_{i=0}^{N_1-1} w_{ik,1} \eta'(u_{i,0}) u_{i,0} \right). \quad (13)$$

Формулы (9) — (13) и аналогичные им формулы для трехслойной нейросети позволяют вычислить приращение параметров на каждом шаге итерации за один прямой проход по слоям нейросети, в отличие от алгоритма обратного распространения ошибки.

Условием завершения работы алгоритма на L -м шаге будем считать выполнение одного из трех ограничений:

$$\begin{aligned} & - \|N_L - N_{L-1}\| < \varepsilon; \\ & - |E_L - E_{L-1}| < \varepsilon; \\ & - L > N_{\max}, \end{aligned}$$

где норма определяется суммой квадратов разностей между параметрами L -й и $L-1$ итерации оптимизации:

$$\begin{aligned} \|N_L - N_{L-1}\| &= \sum_{s=0}^{N_s-1} \sum_{i=0}^{N_s-1} ((b_{i,sL} - b_{i,sL-1})^2 + \\ &+ \sum_{j=0}^{N_s-1} (w_{ji,sL} - w_{ji,sL-1})^2). \end{aligned} \quad (14)$$

Даже простая двухслойная сеть, на вход которой подается двумерный вектор, первый слой содержит 4 нейрона, а второй — один, содержит 18 параметров, по которым необходимо искать минимум критерия. Кроме этого задача оптимизации осложняется тем, что критерий, как функция параметров (рис. 3), обладает локальными минимумами, плоскими или пологими плато и узкими оврагами.

На процесс оптимизации влияет также выбор функции отклика. На рис. 4 представлены вероятности получения различных значений минимального критерия E из случайной точки $[0...1]$ набора параметров для трех функций отклика: функции Гаусса (364 испытания,

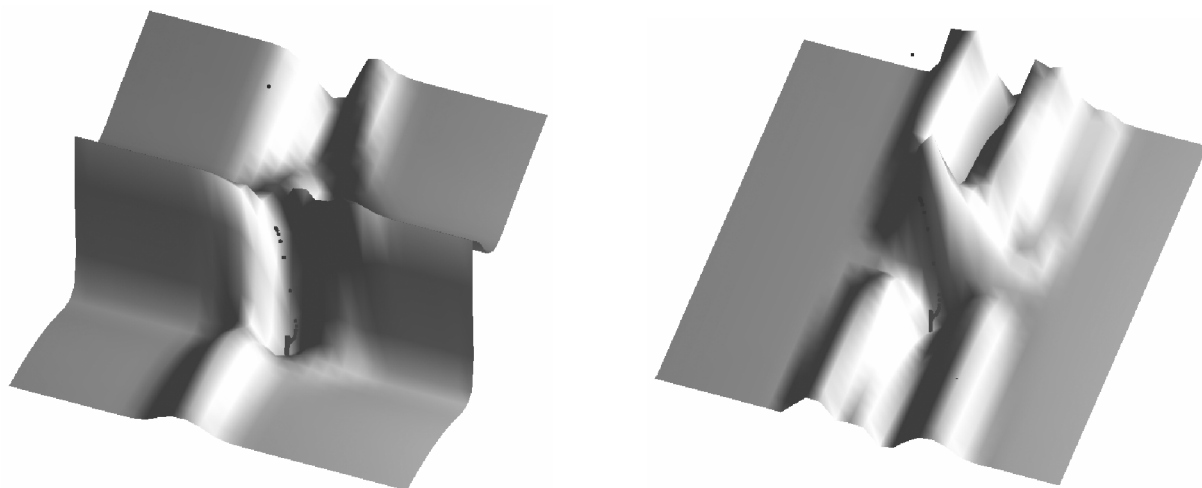
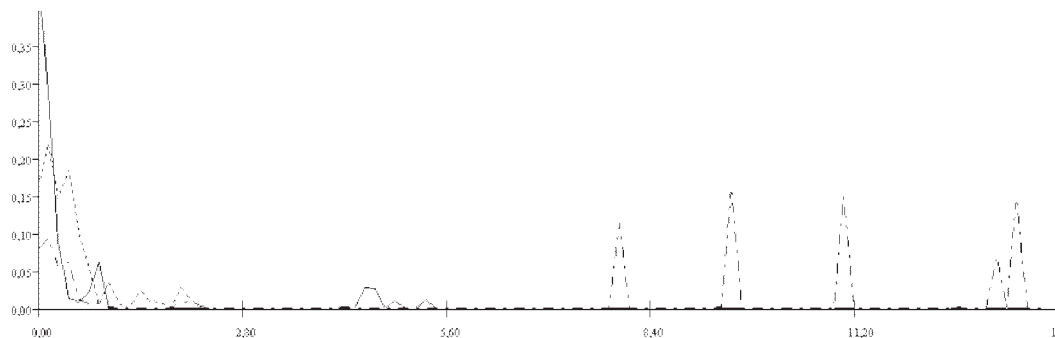


Рис. 3. Зависимость критерия от параметров

Рис. 4. Вероятности получения значений минимального критерия E

сплошная линия), сигмоидальной (598 испытаний, пунктирная линия) и гиперболический тангенс (416 испытаний, штрих-пунктирная линия).

В первую очередь нас интересует получение значений E близких к 0. И в этом смысле функция Гаусса дает лучшие результаты. С ненулевой вероятностью функция Гаусса может дать значения E около 5. Хуже всех результаты для функции отклика в виде гиперболического тангенса. Эта функция уступает функции Гаусса и сигмоидальной функции, а для значений E больших 8 дает целый спектр всплесков вероятности.

Сложный характер поверхности критерия E заставляет внимательно относиться к выбору начальной точки оптимизации. Параметры нейросети, главным образом первого слоя, определяют топологию искомой поверхности. То есть определяют области выпуклости, вогнутости, седловые участки. Впрочем, эти понятия имеют место только для поверхности двух переменных, а для n -мерного случая необходимо рассматривать такие понятия, как тензор кривизны и индексы точек.

Для любой дважды дифференцируемой функции $f(x)$ в критической точке x_0 вводится билинейная форма

$$\frac{\partial^2 f(x_0)}{\partial x_i \partial x_j}, \quad (15)$$

называемая гессианом функции f в точке x_0 .

Индексом невырожденной критической точки x_0 для функции f называется максимальная размерность подпространств $V \subset T_{x_0}(M)$, на которых гессиан $\frac{\partial^2 f(x_0)}{\partial x_i \partial x_j}$ отрицательно определен, т.е. число отрицательных квадратов (собственных значений) билинейной формы после приведения к диагональному виду [6].

Если функция зависит от двух переменных x и y и задана в виде $z = f(x, y)$, то для коэффициентов второй квадратичной формы Q , с элементами $b_{ij} dx^i dx^j$ имеем следующие выражения:

$$b_{11} = \frac{f_{xx}}{\sqrt{1 + f_x^2 + f_y^2}}, \quad (16)$$

$$b_{22} = \frac{f_{yy}}{\sqrt{1 + f_x^2 + f_y^2}}, \quad (17)$$

$$b_{12} = b_{21} = \frac{f_{xy}}{\sqrt{1 + f_x^2 + f_y^2}}. \quad (18)$$

Для коэффициентов первой G квадратичной формы имеем

$$\begin{aligned} g_{11} &= 1 + f_x^2, \\ g_{22} &= 1 + f_y^2, \\ g_{12} &= g_{21} = f_x f_y. \end{aligned} \quad (19)$$

Для определения собственных значений необходимо решить уравнение

$$\det(Q - \lambda G) = 0 \quad (20)$$

или

$$\begin{aligned} (b_{11} - \lambda g_{11})(b_{22} - \lambda g_{22}) - \\ - (b_{12} - \lambda g_{12})^2 = 0. \end{aligned} \quad (21)$$

В силу симметрии и первой и второй квадратичных форм это уравнение всегда имеет вещественные корни. Условие совпадения знаков у собственных значений зависит от знака гауссовой кривизны K , т. к. $\lambda_1 \lambda_2 = \det(Q^{-1}G)$, а гауссова кривизна по теореме, приведенной в «Современной геометрии» [6], равна

$$K = \frac{f_{xx} f_{yy} - f_{xy}^2}{\sqrt{1 + f_x^2 + f_y^2}}. \quad (22)$$

Знак кривизны совпадает со знаком второго инварианта

$$I_2 = \lambda_1 \lambda_2 = \frac{f_{xx} f_{yy} - f_{xy}^2}{g^2}.$$

При $K > 0$ знаки собственных значений совпадают, и их положительность или отрицательность зависит от знака первого инварианта, который легко получить из уравнения (21):

$$I_1 = \lambda_1 + \lambda_2 = \frac{(1 + f_y^2)f_{xx} + (1 + f_x^2)f_{yy} - 2f_x f_y f_{xy}}{g^{3/2}}. \quad (23)$$

В качестве примера рассмотрим обучение нейронной сети для функции

$$f(x, y) = e^{-(x-1)^2 - (y-1)^2} + e^{-(x+1)^2 - (y+1)^2},$$

изображенной на рис. 5, на котором маленькими прямоугольниками обозначены точки с гауссовой кривизной равной 0.

Эта поверхность обладает двумя областями изменения параметров выпуклости, в которых индекс равен 0 и оба собственных значения положительны; двумя областями вогнутости, в

которых индекс равен 2 и оба собственных значения отрицательны. Эти области разделяет область седлового типа, в которой индекс равен 1, и собственные значения имеют разные знаки (рис. 6).

Нейроны первого слоя определяют число и вид областей различных индексов, а каждый нейрон по каждой паре параметров соответствует прямой на плоскости этих параметров. Варьируя параметрами b_i и W_{ji} , можно подобрать примерный вид областей различных индексов (рис. 7).

В результате обучения достигается лучшего минимума критерия E за меньшее число итераций (рис. 8).

На рис. 9 представлена выходная функция обученной нейронной сети с критерием $E = 0.045$. Всплески в начале кривой обусловлены блужданием критерия оптимизации по стенкам узких оврагов с большим шагом.

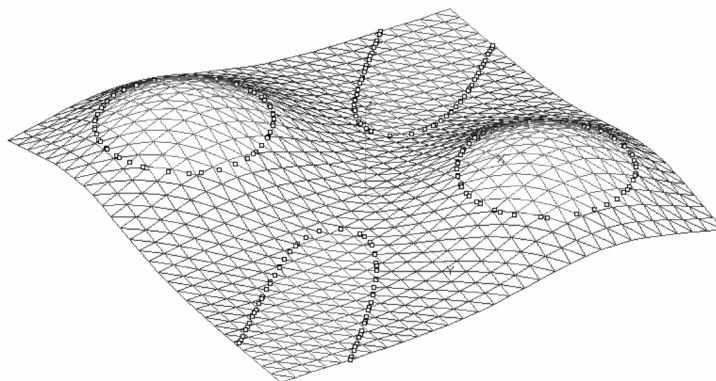


Рис. 5. Поверхность обучающей функции

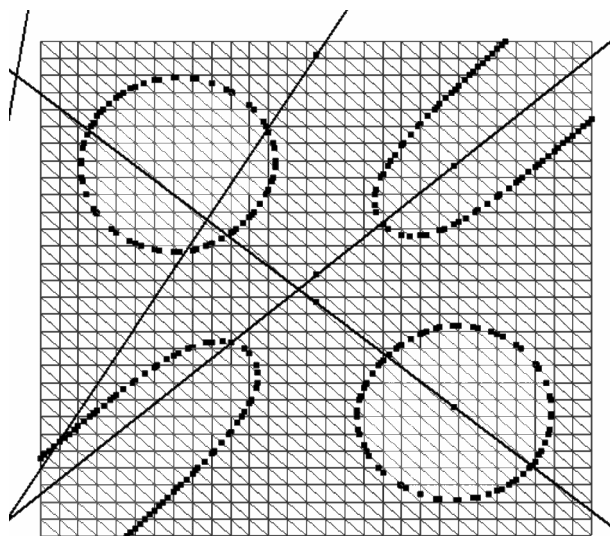


Рис. 6. Области изменения параметров с различными значениями индексов

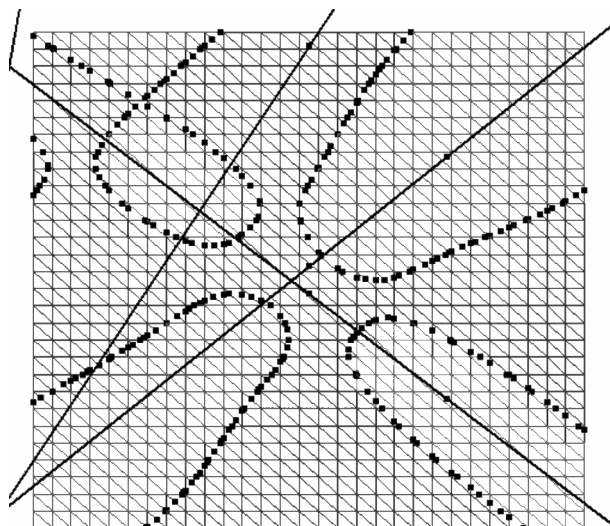


Рис. 7. Подбор параметров b_i и W_{ji} для начала обучения сети

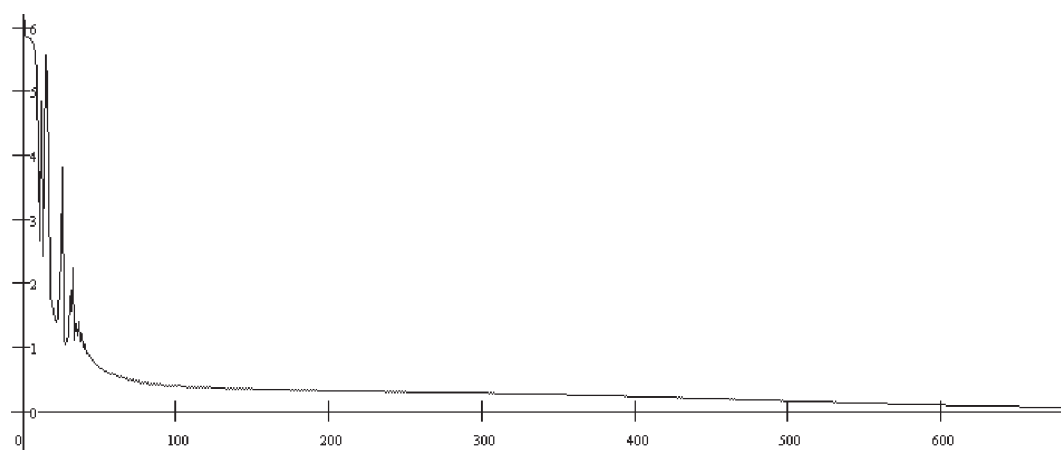


Рис. 8. Зависимость критерия E от номера итерации

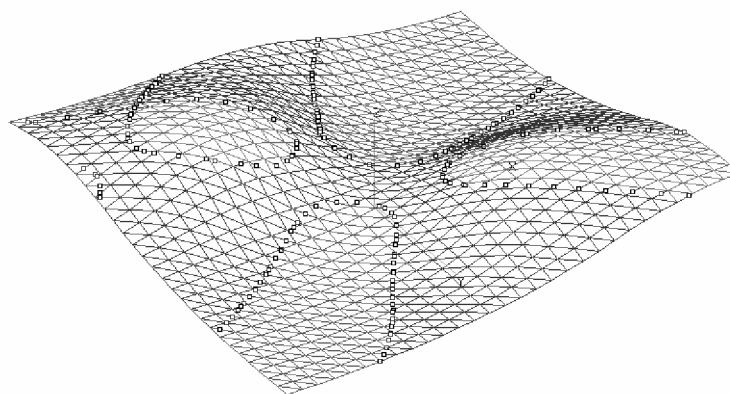


Рис. 9. Выходная функция обученной нейронной сети

Для исследования многослойных нейронных сетей разработан проект, интерфейс которого показан на рис. 10.

Проект позволяет выполнять следующие функции:

- создавать нейронную сеть с любым количеством входов, слоем и нейронов;
- выбирать в качестве источника обучения любую функцию или импортировать таблично заданные обучающие серии;
- выбирать одну из 11-ти функций отклика;

— графически подбирать топологию поверхности, меняя параметры первого слоя;

— обучать нейросеть методом скорейшего спуска;

— изображать обучающую поверхность, выходную поверхность нейросети, поверхность гауссовой кривизны, поверхность критерия в зависимости от любых двух параметров.

Конечно, для n -мерного случая визуальный выбор топологии поверхности по параметрам первого слоя неприемлим. И, в общем случае,

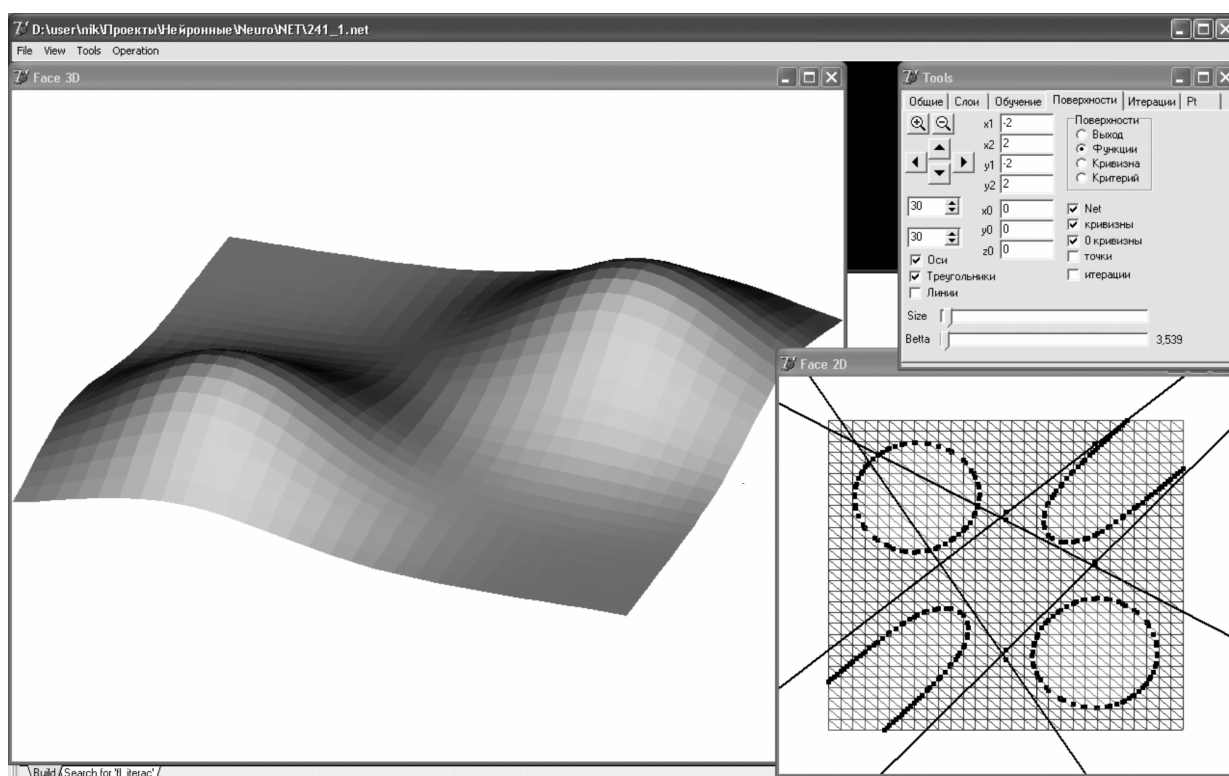


Рис. 10. Проект для изучения нейронных многослойных сетей

необходимо решать эту задачу, например, методами динамического программирования.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Анил К. Введение в искусственные нейронные. Открытые системы / К. Анил Джей, Мао Жианчанг, К. М. Моундин. — 1997. — № 04.
2. Головинский П.А. Кинетика нейронных сетей и искусственные аналоги / П. А. Головинский // Нейрокомпьютеры: разработка и применение. — 2004. № 2—4. — С. 50—59.
3. Горбань А.Н. Нейронные сети на персональном компьютере / А. Н. Горбань, Д. А. Россиев. — Новосибирск: Наука, 1996. — 275 с.
4. Горбань А.Н. Демон Дарвина. Идея оптимальности и естественный отбор / А. Н. Горбань, Р. Г. Хлебопрос. — М.: Наука, 1988. — 208 с.
5. Дли М.И. Локально-аппроксимационные модели сложных объектов / М. И. Дли. — М.: Наука, Физматлит, 1999. — 112 с.
6. Дубровин Б.А. Современная геометрия. Методы и приложения / Б. А. Дубровин, С. П. Новиков, А. Т. Фоменко. — М.: Наука, 1986. — 759 с.
7. Зайцевский И.В. Нейронные сети и их приложения / И. В. Зайцевский, А. П. Свиридов, Д. А. Слесарев. — М.: МЭИ, 2002. — 95 с.
8. Каллан Р. Основные концепции нейронных сетей / Р. Каллан. — М.: Издательский дом Вильямс, 2001. — 287 с.
9. Круглов В.В. Искусственные нейронные сети. Теория и практика / В. В. Круглов, В. В. Борисов. — М.: Горячая линия. — Телеком, 2001. — 382 с.
10. Круглов В.В. Нечеткая логика и нейронные сети / В. В. Круглов, М. И. Дли, Р. Ю. Голунов. — М.: Физматлит, 2001. — 224 с.

11. Люгер Дж.Ф. Искусственный интеллект / Дж. Ф. Люгер. — М. : Вильямс, 2005. — 864 с.
12. Минский М. Перцептон / М. Минский, С. Пейперт. — М. : Мир, 1974. — 261 с.
13. Нейронные сети. STATISTICA Neural Networks. — М. : Горячая линия — Телеком, 2001. — 182 с.
14. Осовский С. Нейронные сети для обработки информации / С. Осовский. — М. : Финансы и статистика, 2002. — 344 с.