

НЕЙРОЭВОЛЮЦИОННОЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ПРОСТРАНСТВА ПРИЗНАКОВ В ЗАДАЧЕ НЕЙРОСЕТЕВОЙ КЛАССИФИКАЦИИ*

*Цой Ю.Р., к.т.н., доцент
Томский политехнический университет,
Томский государственный университет систем управления и
радиоэлектроники
e-mail: yurytsov@gmail.com*

1. ВВЕДЕНИЕ

Одной из основных проблем при решении задач классификации является поиск такого преобразования входных признаков, описывающих объекты, после которого полученные описания становятся разделимыми. В настоящее время существует немало подходов, которые можно разделить на две группы:

1. Уменьшение размерности пространства признаков путем избавления от малоинформативных и/или сильно зашумленных переменных.
2. Увеличение размерности пространства признаков, поскольку в этом случае, уменьшается вероятность неоднозначной классификации объектов [1].

Среди подходов первой группы можно отметить линейный и нелинейный методы главных компонент [2], в которых, производится поиск подпространства пространства признаков, такого, что проекция векторов описаний на это подпространство содержит как можно больше исходной информации. При этом размерность самого подпространства должна быть как можно меньшей, что, в частности, достигается путем формирования подпространства как линейной оболочки, построенной на собственных векторах, соответствующих наибольшему по модулю собственным числам. Иногда стараются выбрать такое преобразование векторов описаний, которое сохраняет расстояние между близкими описаниями, и увеличивает его для различающихся [3]. К методам этой группы можно отнести множество методов, заменяющих исходные описания объектов на коэффициенты разложения по некоторому базису из ортогональных функций,

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 09-08-00309-а

например, разложение в ряд Фурье и вейвлет-преобразование. Также получил распространение способ выбора информативных признаков с использованием эволюционных алгоритмов [4]. В данном способе в бинарной хромосоме в i -м гене кодируется включение, либо исключение i -го исходного признака, и результирующее множество признаков определяется путем эволюционного поиска набора признаков, обеспечивающих наилучшее качество обучения.

В методах второй группы часто рассматривается подход, при котором исходное описание объекта трансформируется в описание, использующее фиксированный для всех задач набор «базисных» элементов (своеобразный алфавит). Примером являются сверточные нейронные сети [5], часто используемые для обработки изображений, в которых на первом слое для каждого пикселя входного изображения определяют, принадлежит ли этот пиксель коротким отрезкам различной ориентации¹, а на последующих слоях рассматривают различные комбинации этих признаков, и комбинации комбинаций, т.е. объекты большего масштаба. Такой подход обеспечивает иерархичность обработки изображений.

В статье [6] рассматривается применение нейроэволюционного подхода для адаптивного увеличения размерности пространства признаков, используемого при обучении искусственной нейронной сети (ИНС) для решения задачи классификации. По результатам решения задач из набора Proben1 было показано, что в ряде случаев подобный подход способен повысить точность классификации по сравнению с традиционным обучением ИНС, однако для некоторых задач было отмечено увеличение количества неточных распознаваний.

В данной статье рассматривается продолжение исследования подхода из [6], направленное на анализ ряда его свойств и выявления возможностей дальнейшего развития.

2. КОМБИНИРОВАННОЕ ОБУЧЕНИЕ ИСКУССТВЕННОЙ НЕЙРОННОЙ СЕТИ

Опишем используемый в статье подход к комбинированному обучению искусственной нейронной сети, при котором одна часть ИНС обучается с применением нейроэволюционного подхода, а другая – с использованием традиционного градиентного алгоритма.

¹ Т.к. обнаружение на изображении отрезка заданной ориентации требует отдельного детектора, то для учета k различных ориентаций для каждого пикселя используется k детекторов, что и приводит к росту размерности трансформированного описания.

В рамках данного подхода ИНС разделяется на две части (пример показан на рис. 1). Отметим, что ИНС не обязательно должна иметь многослойную структуру, достаточно, чтобы в ней можно было выделить группу несвязанных между собой нейронов, через которые должны пройти все маршруты, связывающие входные и выходные нейроны в графе структуры ИНС.

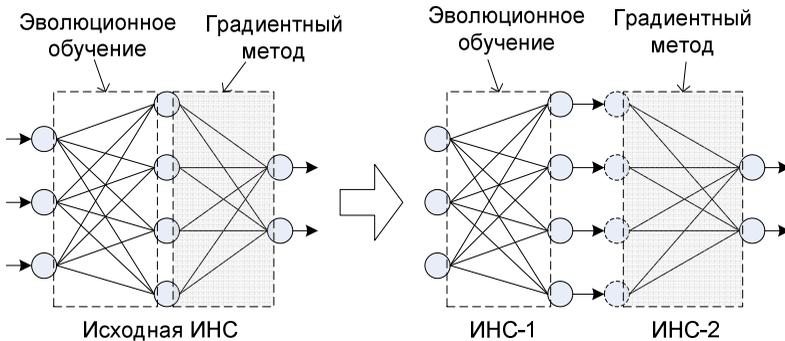


Рис. 1. Общая схема «разделения» ИНС для комбинированного обучения. Входные нейроны ИНС-2 имеют функцию активации $y(x) = x$.

Обозначим подсеть ИНС, обучаемую с использованием эволюционного подхода как ИНС-1, а подсеть, обучаемую с помощью градиентного метода ИНС-2. Тогда выходной сигнал исходной ИНС будет формироваться как выходной сигнал сети ИНС-2, а ее входными сигналами будут выходные сигналы ИНС-1.

В данной статье будем рассматривать ИНС-1 и ИНС-2 без скрытых слоев. Обозначим количество входных нейронов исходной ИНС за n_I , а количество выходных нейронов ИНС-1 за αn_I , где α – константа. Таким образом, в целом совокупность ИНС-1 и ИНС-2 можно рассматривать как одну нейронную сеть с одним скрытым слоем, содержащим αn_I нейронов.

В качестве функции приспособленности ИНС-1 будем использовать средний коэффициент корреляции выходных сигналов ИНС-1:

$$f = \frac{2 \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N R_{Y^i, Y^j}}{N(N-1)}, \quad (1)$$

$$R_{Y^i, Y^j} = \frac{\sum_k (y_k^i - \bar{Y}^i)(y_k^j - \bar{Y}^j)}{N\sigma_{Y^i}\sigma_{Y^j}},$$

где $Y^i = \{y_k^i\}, i = 1, \dots, \alpha n_l, k = 1, \dots, N$ – вектор i -го выходного сигнала ИНС-1, полученный при предъявлении всех наборов из обучающей выборки размера N ; \bar{Y}^i и σ_{Y^i} – соответственно среднее значение и среднеквадратическое отклонение для вектора Y^i .

Обучение ИНС-2 производится после обучения ИНС-1, и в качестве критерия ошибки рассматривается традиционная среднеквадратичная ошибка выходного сигнала.

3. УСЛОВИЯ ЭКСПЕРИМЕНТОВ

Будем рассматривать отдельно задачи минимизации и максимизации функции (1).

Задача минимизации функции (1) направлена на уменьшение корреляции выходных сигналов ИНС-1 для устранения линейной зависимости между ними с тем, чтобы ранг матрицы, составленной из векторов-столбцов Y^i был как можно ближе к αn_l . А максимизация функции (2) может привести к уменьшению «эффективной» размерности пространства признаков для ИНС-2, что может улучшить скорость и результаты обучения.

Можно сделать предположение, что линейные функции активации могут оказаться более «полезными», при решении задачи максимизации функции (1), т.к. для таких функции активации увеличение размерности пространства признаков невозможно (в силу линейности преобразования). Аналогично, можно предположить, что ИНС-1 с нелинейной функцией активации будет более эффективной при обучении, направленном на минимизацию функции (1).

В силу этого для экспериментов будем рассматривать ИНС-1 с сигмоидными функциями активации вида $y = (1 + \exp(-aS))^{-1}$, где a – константа, $S = \mathbf{w}^T \mathbf{x}$ – взвешенная сумма входных сигналов нейрона или линейными вида $y = aS$.

Обучение ИНС-2 производится по алгоритму RPROP (Resilient PROPagation). Используется реализация данного алгоритма из

библиотеки Encog². Комбинированное обучение ИНС осуществляется с применением библиотеки Mental Alchemy³.

Рассматривается ряд задач из набора Proben1 [7], а именно: cancer1, card1, diabetes1, glass1, heart1, horse1 (табл. 1).

Табл. 1. Краткие сведения о рассматриваемых задачах из тестового набора Proben1 [7]

Задача	Количество примеров в обучающей и тестовой выборках	Число входных признаков	Количество классов
cancer1	699	9	2
card1	690	51	2
diabetes1	768	8	2
glass1	214	9	6
heart1	920	35	2
horse1	364	58	3

В качестве эволюционного алгоритма используется вещественный генетический алгоритм с турнирной селекцией, BLX-alpha кроссинговером, гауссовской мутацией и элитаризмом (1 элитная особь). Вероятность кроссинговера и мутации соответственно 0,7 и 1/L, где L – количество генов в хромосоме; размер турнира – 5 особей.

Будем оценивать точность классификации на тестовом множестве по 10 запускам алгоритма. Для каждого запуска для лучшей найденной ИНС-1 обучается 10 различных ИНС-2. Полученная средняя точность классификации будет характеризовать качество рассматриваемой ИНС-1.

Полученные результаты для лучшей комбинированной ИНС по результатам 10 запусков будут сравниваться с базовыми данными из описания набора Proben1 [7], где рассматривается обучение ИНС с применением алгоритма RPROP с «ручным» подбором структуры, а также с результатами из [6], в которых ИНС-1 обучалась с использованием целевой функции

$$f = \max \{e_j, j = 1,2,3\}, \quad f \rightarrow \min ,$$

² <http://www.heatonresearch.com/encog>

³ <http://code.google.com/p/mentalalchemy/>

где e_j – ошибка обучения ИНС-2 по алгоритму RPROP (Resilient PROPagation) на протяжении 50 эпох. Использовалась максимальная ошибка по трем попыткам обучения ИНС для того, чтобы уменьшить вероятность переобучения нейронной сети.

4. РЕЗУЛЬТАТЫ ЭКСПЕРИМЕНТОВ

Средние значения ошибок классификации для различных алгоритмов обучения комбинированной ИНС и сравнение с лучшими результатами из [7] и [6] представлено в табл. 2. В скобках приведены среднеквадратические отклонения. Жирным шрифтом выделены наилучшие результаты с уровнем значимости 0,05.

Табл. 2. Точность классификации на тестовом множестве для различных алгоритмов. В скобках приведено среднеквадратичное отклонение

Задача	Мин. корреляции	Макс. корреляции	Мин. ошибки [6]	Стандартное обучение ИНС [7]
cancer1	1,03 (0,53)	1,26 (0,45)	2,07 (0,73)	1,38 (0,49)
card1	11,28 (0,30)	12,21 (0,39)	10,17 (0,63)	14,05 (1,03)
diabetes1	22,55 (0,95)	22,24 (0,65)	21,51 (0,43)	24,10 (1,91)
glass1	25,66 (0,97)	27,17 (0,97)	26,41 (0)	32,70 (5,34)
heart1	17,04 (0,34)	18,43 (0,42)	17,74 (1,02)	19,72 (0,96)
horse1	24,51 (0,53)	28,35 (2,25)	34,40 (3,84)	29,19 (2,62)

Во всех рассматриваемых задачах удалось улучшить точность классификации по сравнению с ручным подбором структуры ИНС и последующим градиентным обучением, описанным в [7].

В табл. 3 описаны настройки описываемого алгоритма, при которых были получены лучшие результаты. Обозначения, используемые в табл. 3: g – количество поколений обучения ИНС-1, t – число эпох обучения ИНС-2, «S» и «L» – соответственно сигмоидная и линейная функции активации выходных нейронов ИНС-1.

Во многих случаях потребовалась тщательная настройка параметров алгоритма комбинированного обучения ИНС: количества поколений обучения ИНС-1 и числа эпох для обучения ИНС-2, функций активации и числа нейронов в выходном слое ИНС-1, а также

целевой функции. Таким образом, настройка параметров является одной из важных задач применения предлагаемого алгоритма, требующей формулировки ряда соответствующих рекомендаций.

Табл. 3. Настройки алгоритма комбинированного обучения ИНС, при которых были получены наилучшие

Задача	Минимизация корреляции				Максимизация корреляции			
	α	g	t	ф-я акт.	α	g	t	ф-я акт.
cancer1	2,5	50	100	S	1	50	100	S
card1	0,25	300	10	L	0,5	300	100	L
diabetes1	1,5	10	300	S	3	10	500	S
glass1	2	50	200	S	3	50	1000	S
heart1	0,5	30	500	L	0,5	30	500	S
horse1	0,25	100	100	L	0,25	50	100	S

Для задач с большим количеством признаков в описании объектов наилучшие результаты были получены при уменьшении размерности пространства признаков и с использованием линейной функции активации в выходных нейронах ИНС-1 (кроме задач heart1 и horse1 при максимизации (1)). В то же время для задач со сравнительно малым количеством признаков потребовалось увеличение размерности признакового пространства и сигмоидные функции активации. Таким образом, оправдалось выдвинутое ранее предположение о применимости различных функций активации.

Увеличение размерности пространства признаков часто требует повышения времени обучения ИНС-2, что может быть связано с ростом числа настраиваемых параметров – весов связей. Однако, в целом, время обучения ИНС-2 сравнительно невелико.

Также отметим, что, несмотря на то, что обучение ИНС-1 с максимизацией корреляции между выходными сигналами не привело к получению наилучшего результата ни для одной из рассматриваемых задач, в большинстве случаев точность классификации превосходила таковую для ИНС с традиционным подходом к обучению [7], и в некоторых случаях позволила повысить точность классификации по сравнению с [6] и минимизацией корреляции.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Как показывают результаты экспериментов, предлагаемый метод комбинированного обучения ИНС позволяет получить лучшие результаты, чем традиционный подход к обучению ИНС.

В силу выявленных сложностей, связанных с подбором параметров комбинированного обучения, представляют интерес следующие направления исследований:

1. Обучение ИНС-1 с использованием целевой функции, представляющей линейную комбинацию целевой функции из [6] и (1).
2. Использование комитета ИНС, обученных с использованием комбинированных подходов на различных целевых функциях и/или настройках параметров.
3. Разработка алгоритма эволюции ИНС-1, который позволял бы адаптировать количество выходных нейронов ИНС-1 и функции активации. Любопытно, что это, возможно, первая или одна из первых практических задач, в которых возникает необходимость использования алгоритма, позволяющего изменять число входов и выходов ИНС.
4. Использование вместо ИНС-1 с фиксированной структурой ИНС с изменяющимися в ходе эволюции структурой весов связей и количеством скрытых нейронов.

Дальнейшие исследования будут проводиться по одному из перечисленных направлений.

Литература

1. Cover T.M. Geometrical and Statistical Properties of Systems of Linear Inequalities with Applications in Pattern Recognition // IEEE Transactions on Electronic Computers. – 1965. – EC Vol. 14, № 3. – P. 326-334.
2. Principal Manifolds for Data Visualisation and Dimension Reduction / A. Gorban, B. Kegl, D. Wunsch, A. Zinovyev (Eds.). – LNCSE 58. – Springer, Berlin – Heidelberg – New York, 2007.
3. Weinberger K.Q., Saul L.K. Unsupervised learning of image manifolds by semidefinite programming // Proc. of the 2004 IEEE Comp. Soc. Conf. on Comp. Vision and Pattern Recognition, 2004. CVPR 2004. – P. II-988–II-995.
4. Vafaie H., De Jong K. Genetic Algorithms as a Tool for Feature Selection in Machine Learning // Proc. of the Fourth Int. Conf. on Tools with Artificial Intelligence, 1992. TAI '92. – IEEE Press, 1992. – P. 200-203.
5. LeCun Y., Bottou L., Bengio Y., Haffner P. Gradient-based learning applied to document recognition // Proceedings of the IEEE. – 1998. – P. 2278-2324.
6. Цой Ю.Р. Об адаптивном увеличении размерности пространства признаков // 12-я Национальная конференция по искусственному интеллекту с международным участием: Труды – Тверь, 20-24 сентября 2010. – Москва: Физматлит, 2010. – Т. 4. – С. 134-140.
7. Prechelt L. PROBEN1 – a set of neural network benchmark problems and benchmarking rules. Technical Report 21/94. – Fakultat fur Informatik, Universitat Karlsruhe, Karlsruhe, Germany, 1994.