

Повышение качества комбинированного обучения нейронных сетей*

Цой Ю. Р.

yurytsoy@gmail.com

Томск, Томский политехнический университет

Томск, Томский университет систем управления и радиоэлектроники

В данной статье описывается применение комбинированного подхода к обучению искусственной нейронной сети (ИНС), объединяющего нейроэволюционное преобразование пространства признаков с последующим «градиентным» обучением ИНС, получающей на вход модифицированные описания объектов. Результаты показывают, что в качестве целевой функции для нейроэволюционного преобразования признаков возможно использование достаточно общего критерия, не зависящего от задачи и требующего минимизации недиагональных элементов матрицы Грама для нормализованных векторов выходных сигналов. Использование такого критерия частично избавляет от проблемы поиска оптимальных параметров алгоритмов обучения. Предлагаются возможные направления будущих исследований, связанные с развитием предлагаемого подхода и реализацией инкрементного обучения.

Improving quality of the combined training of neural networks*

Tsoy Y. R.

Tomsk polytechnic university, Tomsk, Russia

Tomsk state university of control systems and radioelectronics, Tomsk, Russia

In this paper a combined approach to training of an artificial neural network (ANN) is proposed. The approach is based upon neuroevolutionary transform of the input features space with a consequent gradient training of ANN, which accepts modified objects' descriptions. The results show that, that neuroevolutionary transform of the input features can be driven by a rather generic criterion, concerning minimization of non-diagonal elements of the Gram matrix, computed for the normalized output signals. It is shown that use of such a criterion leads to potential decrease of the tunable parameters of the ANN training algorithms. Future research directions are proposed, which consider possible extension of the approach and implementation of the incremental learning.

При решении задач классификации для данного множества описаний $\mathbf{X} = \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N\}$, $\mathbf{x}_i \in R^n$ объектов часто априори неизвестно, каким образом их необходимо обработать, чтобы повысить качество классификации. В частности, неизвестно, нужно ли увеличивать или уменьшать размерность пространства поиска. Оба варианта имеют свои сильные и слабые стороны, и могут оказаться полезными в различных ситуациях. Например, широко распространены методы уменьшения размерности пространства признаков [1, 2]. С другой стороны, часто рассматривается увеличение размерности пространства признаков, направленное на такое преобразование описаний объектов, которое позволяет с большей вероятностью построить дискриминантную функцию, отделяющую описания объектов из разных классов [6].

Поскольку оптимальное преобразование пространства признаков заранее неизвестно, то разработка методов поиска такого преобразования является актуальной задачей. При этом критерии, которым должно подчиняться искомое преобразование также могут различаться. Например, при разложении исходных описаний по ортогональным функци-

ям таким критерием может выступать минимизация отличий между исходным и полученным описаниям, а при использовании вероятностного подхода к классификации — максимизация вероятности порождения множества \mathbf{X} . В данной статье рассматривается применение нейроэволюционного подхода для преобразования пространства признаков с использованием достаточно общего критерия, требующего линейной независимости признаков в модифицированном описании, с последующим обучением искусственной нейронной сети (ИНС).

Комбинированное обучение нейронной сети

В рамках комбинированного подхода к обучению ИНС предлагается разделение ИНС на две части (рис. 1) и обучение ИНС-1, отвечающей за преобразование описаний объектов, с использованием эволюционного подхода, а ИНС-2 — с применением традиционного градиентного метода. В данном исследовании рассматриваются ИНС с многослойной структурой, однако подобный подход применим и к ИНС с произвольной структурой связей.

Обученные ИНС-1 и ИНС-2 можно объединить в одну сеть таким образом, что выходные сигналы ИНС-1 будут являться входными для ИНС-2. Процедура комбинированного обучения ИНС пред-

Исследование поддержано Российским фондом фундаментальных исследований (проекты № 09-08-00309-а, 11-07-00027-а).

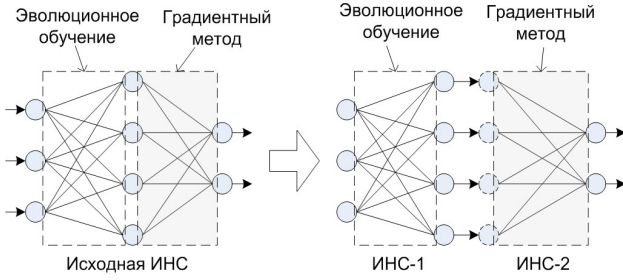


Рис. 1. Общая схема разделения ИНС для «комбинированного» обучения. Входные нейроны ИНС-2 имеют функцию активации $y(x) = x$.

Алгоритм 1. Алгоритм комбинированного обучения ИНС.

- Вход:** Обучающее $D_{train} = \{(\mathbf{X}_{t,0}, \mathbf{Y}_{t,0}), \dots, (\mathbf{X}_{t,n1}, \mathbf{Y}_{t,n1})\}$ и проверочное $D_{validation} = \{(\mathbf{X}_{v,0}, \mathbf{Y}_{v,0}), \dots, (\mathbf{X}_{v,n2}, \mathbf{Y}_{v,n2})\}$ множества, параметры ИНС-1 и ИНС-2, параметры алгоритмов обучения ИНС-1 и ИНС-2, количество K обучаемых ИНС-2;
- 1: Эволюционное обучение ИНС-1 $Net1$ с использованием D_{train} ;
 - 2: Формирование обучающего множества для ИНС-2: $D'_{train} = \{(\mathbf{Y}'_{t,0}, \mathbf{Y}_{t,0}), \dots, (\mathbf{Y}'_{t,n1}, \mathbf{Y}_{t,n1})\}$, где $\mathbf{Y}'_{t,i}$ – выходной сигнал $Net1$ при подаче на вход вектора $(\mathbf{X}_{t,i})$;
 - 3: Обучение K ИНС-2 с использованием D'_{train} : $\{Net2_1, \dots, Net2_K\}$ и с применением градиентного алгоритма;
 - 4: Выбор среди множества ИНС $\{Net1 + Net2_i, i = 1, \dots, K\}$ лучшей на основании ошибки на проверочном множестве $D_{validation}$;
 - 5: Вернуть лучшую найденную ИНС;

ставлена алгоритмом 1 (операция $Net1 + Net2$ означает объединение двух ИНС в одну).

Изменяя количество выходных нейронов ИНС-1 и их функцию активации можно изменять свойства преобразования признаков, осуществляемого ИНС-1. Будем обозначать количество выходных сигналов ИНС-1 как αn , где $\alpha \in R$ – некоторая константа, n – количество входных нейронов ИНС-1 (размерность исходных описаний объектов).

Критерий оценки нейроэволюционного алгоритма

Можно предложить различные критерии обучения ИНС-1. Например, в [3] рассматривается ошибка пробного обучения ИНС-2, а в [4] в качестве критерия выступает корреляция между выходными сигналами ИНС-1. Первый способ позволяет в явном виде оценить качество преобразования признаков, осуществляемое ИНС-1, однако он суще-

ственно сложнее с вычислительной точки зрения, т.к. на каждом поколении эволюционного поиска параметров ИНС-1 требуется $O(10^3 - 10^4)$ эпох обучения ИНС-2. В [4] было показано, что можно заменить вычислительно более простой корреляционный критерий к оценке ИНС-1

$$f = \frac{2 \sum_{i,j>i} |R_{Y_i, Y_j}|}{N(N-1)} \rightarrow \min, \quad (1)$$

где R_{Y_i, Y_j} – коэффициент корреляции между i -м и j -м выходными сигналами. При этом в ряде случаев была получена более высокая точность распознавания на тестовом множестве. Однако использование критерия (1) требует тщательного подбора параметров алгоритмов обучения и структуры ИНС-1 и ИНС-2 [4], что затрудняет его использование. Это может быть вызвано недостатками преобразования, осуществляемого ИНС-1, в частности, тем, что модифицированные описания могут располагаться близко друг к другу.

Поскольку коэффициент корреляции равен 0, если равна нулю ковариация, то рассмотрим ковариацию двух векторов $\mathbf{Y}_1 = (y_{1,1}, y_{1,2}, \dots, y_{1,N})^T$ и $\mathbf{Y}_2 = (y_{2,1}, y_{2,2}, \dots, y_{2,N})^T$

$$Cov(\mathbf{Y}_1, \mathbf{Y}_2) = \frac{1}{N} (\mathbf{Y}_1 - \bar{Y}_1 \mathbf{1})^T (\mathbf{Y}_2 - \bar{Y}_2 \mathbf{1}),$$

где \bar{Y}_i – среднее значение компонент вектора \mathbf{Y}_i , $\mathbf{1}$ – вектор единиц. Раскрывая скобки, после упрощения получим:

$$NCov(\mathbf{Y}_1, \mathbf{Y}_2) = \mathbf{Y}_1^T \mathbf{Y}_2 + r,$$

где $r = -N\bar{Y}_1\bar{Y}_2$. Отсюда следует, что ковариация двух ортогональных векторов обращается в нуль, только если среднее значение компонент хотя бы одного из векторов равно 0.

Учитывая, что многие распространенные функции активации (лог-сигмоидная, Гауссиан, единичного скачка) неотрицательны, критерий (1) может быть удовлетворен и в том случае, если выходные сигналы ИНС-1 не ортогональны. Это может означать, что модифицированные описания объектов занимают в пространстве признаков объем, меньший максимально возможного, что может уменьшить различие между описаниями объектов из разных классов. Для исправления этого недостатка предлагается использовать следующий критерий

$$f = \frac{2 \sum_{i,j>i} G(i, j)}{\alpha n(\alpha n - 1)} + \pi \rightarrow \min, \quad (2)$$

где $G(i, j)$ – элемент матрицы Грамма для i -го и j -го нормализованных выходных сигналов ИНС-1, $\hat{\mathbf{Y}}_i = \mathbf{Y}_i / |\mathbf{Y}_i|$, π – количество нулевых элементов

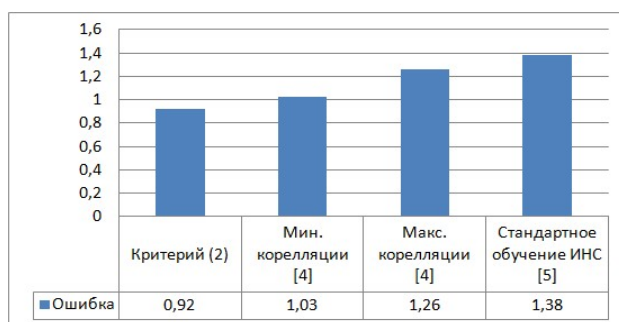


Рис. 2. Результаты для задачи cancer1.

на главной диагонали в матрице Грамма. Нормализация выходных сигналов нужна, чтобы избежать преимуществ у ИНС-1 с малыми значениями выходных сигналов.

Условия экспериментов

Для проверки комбинированного обучения с критерием (2) будем использовать задачи из набора Proben1 (cancer1, card1, diabetes1, glass1, heart1, horsel) [5]. Алгоритм для обучения ИНС-2 — RPROP¹. Комбинированное обучение ИНС осуществляется с применением библиотеки MentalAlchemy².

Для всех запусков количество поколений обучения ИНС-1 равняется 50; размер популяции — 100 особей; рассматривается турнирная селекция с турниром из 5 особей, одна элитная особь; вещественное кодирование. Количество эпох для обучения ИНС-2 — 100. Будем рассматривать 3 функции активации выходных нейронов ИНС-1:

- линейная $y = S$, где $S = \mathbf{w}^T \mathbf{x}$ — взвешенная сумма входных сигналов \mathbf{x} , \mathbf{w} — вектор весов входных сигналов нейрона;
- лог-сигмоидная $y = (1 + \exp(-aS))^{-1}$, $a \in R$;
- гауссова $y = \exp(-|\mathbf{w} - \mathbf{x}|^2)$.

Параметр α , определяющий количество выходных сигналов ИНС-1, изменяется в диапазоне $[0.5, \dots, 3]$ с шагом 0.5. Для каждой ИНС-1 обучаются 10 ИНС-2. По 10 запускам комбинированного обучения выбирается ИНС дающая наименьшую ошибку классификации на тестовом множестве.

Результаты экспериментов

Средние значения ошибок классификации для различных алгоритмов обучения комбинированной ИНС и сравнение с лучшими результатами из [5] и [4] представлено на рис. 2–7.

Из приведенных данных видно, что в задаче card1 комбинированное обучение с применением



Рис. 3. Результаты для задачи card1.



Рис. 4. Результаты для задачи diabetes1.



Рис. 5. Результаты для задачи glass1.



Рис. 6. Результаты для задачи heart1.

критерия (2) уступает результатам из [4], однако необходимо отметить, что при использовании корреляционного критерия (1) процесс поиска параметров алгоритма обучения занимает много време-

¹Для реализации алгоритма RPROP использовалась библиотека Encog: <http://www.heatonresearch.com/encog>

²<http://code.google.com/p/mentalalchemy/>



Рис. 7. Результаты для задачи horse1.

ни. В случае использования критерия (2) удалось получить сопоставимые результаты без трудоемкого подбора оптимального количества поколений и эпох обучения ИНС-1 и ИНС-2. Настраивались только количество выходных сигналов ИНС-1 и их функции активации.

Заключение

В статье предлагается использование критерия, основанного на минимизации недиагональных элементов матрицы Грамма, для обучения ИНС-1 при комбинированном подходе к обучению. Результаты экспериментов показывают, что во многих случаях удается достичь сравнительно высокой точности распознавания без необходимости тщательного подбора параметров алгоритмов обучения ИНС-1 и ИНС-2. При этом получаемые результаты превосходят таковые для традиционного подхода с градиентным алгоритмом обучения ИНС.

Дальнейшие исследования могут проводиться по следующим направлениям:

- Адаптация эволюционного алгоритма обучения ИНС-1 для автоматического поиска количества выходных нейронов и их функций активации.
- Организация инкрементного обучения, при котором обучение ИНС-1 и ИНС-2 чередуется. Например, после обучения на протяжении t_1 поколений ИНС-1 производится обучение ИНС-2 в течение t_2 эпох, так же как описано в данной статье. После этого для имеющейся ИНС-2 снова осуществляется эволюционный поиск ИНС-1 (дообучение ИНС-1) на t_1 поколений, которая позволяет повысить точность классификации ИНС-2. Затем ИНС-2 снова дообучается. Данный процесс может повторяться до тех пор, пока не наступит условие останова (например, заданное количество таких итераций, либо проверка по ранней остановке (early stopping)). В дальнейшем процесс дообучения можно будет запустить снова. Благодаря подстройке преобразования входных признаков, путем адаптации ИНС-1 теоретически возможна адаптация к изменениям в обучающих данных, однако этот аспект требует отдельного изучения.

Литература

- [1] Gorban A., Kegl B., Wunsch D., Zinovyev A. (Eds.) Principal Manifolds for Data Visualisation and Dimension Reduction. — LNCSE 58. — Berlin-Heidelberg-New York: Springer, 2007.
- [2] 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. — TAG'92. — IEEE Press, 1992. — P. 200-203.
- [3] Цой Ю. П. 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.
- [4] Цой Ю. П. Нейроэволюционное преобразование пространства признаков в задаче нейросетевой классификации // VI-я Международная научно-практическая конференция «Интегрированные модели и мягкие вычисления в искусственном интеллекте» (16-19 мая 2011 г., Коломна). — 2011. — В печати.
- [5] 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.
- [6] 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.