

Нейронные сети. Краткий курс.

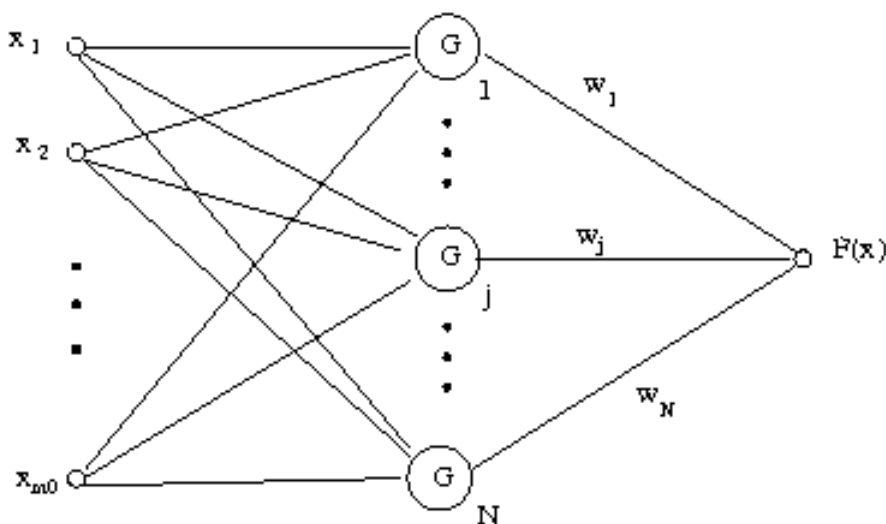
Лекция 6

Сети регуляризации

Для реализации регуляризированной функции аппроксимации

$$F(x) = \sum_{i=1}^N w_i G(x, x_i) \quad (6.1)$$

используется структура сети, показанная ниже на рисунке.



В этой сети каждому примеру обучения соответствует свой нейрон в скрытом слое. Сеть является универсальным аппроксиматором, в том смысле, что при большом количестве нейронов она хорошо аппроксимирует любую непрерывную функцию на компактном подмножестве \mathbb{R}^{m_0} .

Обобщенные сети на основе радиальных базисных функций

Однозначное соответствие между примерами обучения x_i и функциями Грина $G(x, x_i)$, $i=1, 2, \dots, N$ порождает сеть, которая при больших N становится

ресурсоемкой, поскольку требует обращения матрицы размера $N \times N$, вычислительная сложность которого порядка N^3 . Для больших матриц существенно ухудшается обусловленность. Поэтому возникает задача упрощения сети регуляризации, уменьшения ее сложности. Для этого ищется субоптимальное решение на основе метода, который в вариационных задачах называется *методом Галеркина*.

Решение ищется в виде разложения по конечному базису

$$F^*(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{m_1} w_i \phi(\mathbf{x}) , \quad (6.2)$$

где $\phi(\mathbf{x})$, $i=1,2,\dots,m_1$ - новое множество базисных функций, а w_i - новый набор весов. Обычно m_1 меньше числа примеров обучения N . В случае радиальных базисных функций

$$\phi(\mathbf{x}) = G(\|\mathbf{x}-\mathbf{t}_i\|), \quad i=1,2,\dots,m_1 , \quad (6.3)$$

где множество центров \mathbf{t}_i необходимо определить. Подстановка (6.2) в (6.3) дает

$$F^*(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{m_1} w_i G(\|\mathbf{x}-\mathbf{t}_i\|) . \quad (6.4)$$

Задача определения весов w_i для заданного разложения (6.4) сводится к минимизации нового функционала:

$$E(F^*) = \sum_{i=1}^N \left(d_i - \sum_{j=1}^{m_1} w_j G(\|\mathbf{x}_i - \mathbf{t}_j\|) \right)^2 + \lambda \| \mathbf{D} F^* \|^2 . \quad (6.5)$$

Первое слагаемое в (6.5) можно выразить как квадрат Евклидовой нормы

$$\| \mathbf{d} - \mathbf{G} \mathbf{w} \|^2 , \quad (6.6)$$

$$\text{где } \mathbf{d} = \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \vdots \\ d_N \end{pmatrix}, \quad \mathbf{w} = \begin{pmatrix} w_1 \\ \vdots \\ w_{m_1} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{G} = \begin{pmatrix} G(\mathbf{x}_1, \mathbf{t}_1) & \dots & G(\mathbf{x}_1, \mathbf{t}_{m_1}) \\ \vdots & \dots & \vdots \\ G(\mathbf{x}_N, \mathbf{t}_1) & \dots & G(\mathbf{x}_N, \mathbf{t}_{m_1}) \end{pmatrix} .$$

Матрица \mathbf{G} имеет размер $N \times m_1$, следовательно она уже не симметрическая. Квадрат нормы в втором слагаемом в (6.5) можно выразить следующим образом:

$$\|DF^*\|^2 = (DF^*, DF^*)_H = \left(\sum_{i=1}^{m_1} w_i G(x, t_i), \tilde{D} D \sum_{i=1}^{m_1} w_i G(x, t_i) \right)_H =$$

(использовано определение сопряженного оператора $(u, Dv) = (v, \tilde{D}u)$)

$$= \left(\sum_{i=1}^{m_1} w_i G(x, t_i), \sum_{i=1}^{m_1} w_i \delta(x - t_i) \right)_H =$$

(воспользовались определением функции G такой что $LG(x, \xi) = \delta(x - \xi)$, $L = \tilde{D}D$)

$$= \sum_{j=1}^{m_1} \sum_{i=1}^{m_1} w_j w_i G(t_j, t_i) = \mathbf{w}^T \mathbf{G}_0 \mathbf{w} , \quad (6.7)$$

где $\mathbf{G}_0 = \begin{pmatrix} G(t_1, t_1) & \dots & G(t_1, t_{m_1}) \\ \vdots & \dots & \vdots \\ G(t_{m_1}, t_1) & \dots & G(t_{m_1}, t_{m_1}) \end{pmatrix}$ - симметрическая матрица размера $m_1 \times m_1$.

Если провести те же рассуждения как в прошлой лекции начиная с (5.2) в предыдущей лекции для функционала $E(F^*)$ в (6.5), то его минимизация по отношению к вектору $\mathbf{w} = (w_1, w_2, \dots, w_{m_1})^T$ приводит к системе

$$(\mathbf{G}^T \mathbf{G} + \lambda \mathbf{G}_0) \mathbf{w} = \mathbf{G}^T \mathbf{d} , \quad (6.8)$$

то есть веса определяются как

$$\mathbf{w} = (\mathbf{G}^T \mathbf{G} + \lambda \mathbf{G}_0)^{-1} \mathbf{G}^T \mathbf{d} , \quad (6.9)$$

где обращать нужно матрицу размером $m_1 \times m_1$. Если $\lambda = 0$, то (6.9) переходит в решение переопределенной системы $\mathbf{G} \mathbf{w} = \mathbf{d}$, то есть в

$$\mathbf{w} = \mathbf{G}^+ \mathbf{d} ,$$

где $\mathbf{G}^+ = (\mathbf{G}^T \mathbf{G})^{-1} \mathbf{G}^T$ - псевдообратная матрица.

Поскольку разные компоненты вектора \mathbf{x} могут относиться к разным классам, то есть быть различными параметрами имеющими разный масштаб вариации, разную физическую размерность, то более целесообразным является определения аргумента радиальной базисной функции не как Евклидовой нормы, а как *взвешенной нормы*, то есть

$$\|\mathbf{x}\|_C^2 = (\mathbf{C} \mathbf{x})^T (\mathbf{C} \mathbf{x}) = \mathbf{x}^T \mathbf{C}^T \mathbf{C} \mathbf{x} , \quad (6.10)$$

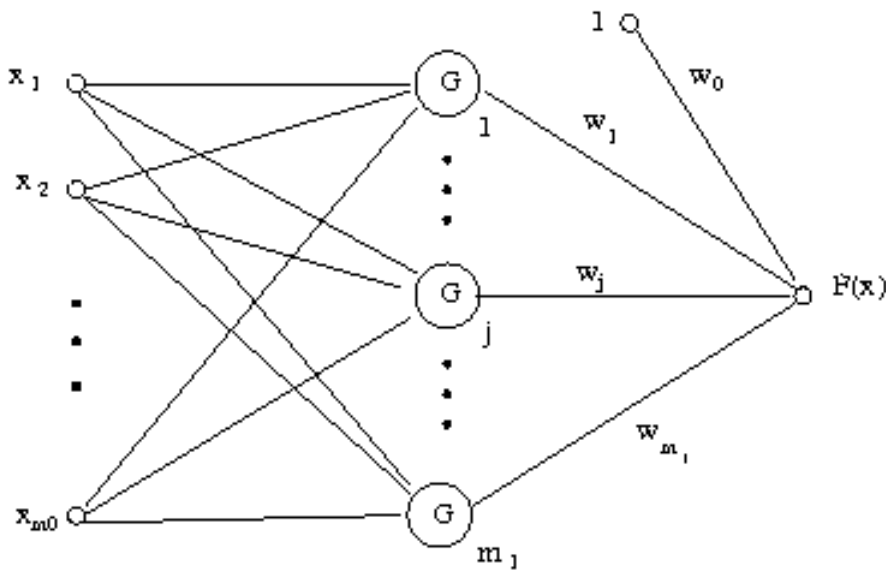
где C - матрица взвешенной нормы размера $m_0 \times m_0$. Теперь аппроксимация в общей форме будет иметь вид

$$F^*(x) = \sum_{i=1}^{m_1} w_i G(\|x - t_i\|_C) \quad (6.11)$$

При использовании многомерной функции Гаусса, она может быть представлена как

$$G(\|x - t_i\|_C) = \exp(-(x - t_i)^T C^T C (x - t_i)) = \exp(-\frac{1}{2}(x - t_i)^T S_x^{-1} (x - t_i)) \quad (6.12)$$

где $\frac{1}{2}S_x^{-1} = C^T C$. То есть (6.12) можно рассматривать как многомерное нормальное распределение с ковариационной матрицей S_x (без нормирующего множителя). Обобщенная сеть показана на рисунке ниже.



В процессе обучения такой сети необходимо в общем случае определить веса w_i , центры t_i , $i=1,2,\dots,m_1$, матрицу C или S_x . Матрица ковариации S_x в случае гауссовой радиальной функции $G(\|x - t_i\|_C)$ определяет *рецептивное поле* или *поле чувствительности*, то есть подмножество области определения вектора x , где функция G принимает значения выше некоторого порога. Ниже приведены некоторые способы задания матрицы S_x :

- 1) $S_x = \sigma^2 I$, где σ^2 - общая дисперсия, I - единичная матрица. Рецептивное поле в этом случае ограничено гиперсферой.

2) $\mathbf{S}_x = \text{diag}(\sigma_1^2, \sigma_2^2, \dots, \sigma_{m_0}^2)$, где σ_j^2 - дисперсия j-го компонента вектора \mathbf{x} .

Рецептивное поле ограничено гиперэллипсоидом, полуоси которого совпадают с осями \mathbb{R}^{m_0} и имеют длину σ_j .

3) \mathbf{S}_x - недиагональная положительно определенная матрица.