

## КОНСТРУКТИВНЫЙ АЛГОРИТМ СИНТЕЗА СТРУКТУРЫ МНОГОСЛОЙНОГО ПЕРСЕПТРОНА

Царегородцев В.Г.

tsar@neuropro.ru    www.neuropro.ru

*Для нахождения оптимальной структуры обучаемой с учителем слоистой нейронной сети предлагается алгоритм, основанный на расчете и минимизации критериев Бартлетта или Мураты-Амари, оценивающих ошибку обобщения для пробных шагов модификации структуры сети элементарными структурообразующими операциями, лучшая из которых выбирается для применения на текущем шаге или до момента смены поведения критерия.*

### ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

В настоящее время в задачах обработки и анализа данных широко применяются искусственные нейронные сети [1,2]. Одна из нейросетевых парадигм – многослойные персептроны, обучаемые алгоритмами на основе метода обратного распространения ошибки [1,2], – наиболее часто используется для решения задач классификации с учителем, регрессии, нелинейного сжатия данных. Нейросети, обучаясь на обучающих выборках, настраивают свои адаптивные внутренние коэффициенты для минимизации расхождения между выходными сигналами сети и эталонными значениями и затем могут интер- и экстраполировать аппроксимированную зависимость.

Наряду с важностью обеспечения репрезентативности обучающей выборки проблемой является нахождение оптимальной структуры нейросети – числа слоев нейронов и числа нейронов в каждом слое. Пользователь обычно использует структуру, предлагаемую компьютерной программой-нейроимитатором по умолчанию, и только в случаях невозможности достижения нужной точности обучения сети при или неудовлетворительной точности распознавания тестовой выборке изменяет размер сети, но делает это обычно методом случайного поиска. Случайный поиск используется и при оптимизации структуры нейросети генетическим алгоритмом.

Автоматическое решение задачи нахождения субоптимальной структуры предлагают конструктивные алгоритмы синтеза нейронной сети, например, алгоритм каскадной корреляции [3]. Однако, многие разработчики и исследователи конструктивных алгоритмов (список работ в этом направлении перечислен в обзорах [4-6]) отмечают частую избыточность получаемой структуры нейронной сети. Такая избыточность приводит к излишней нелинейности реализуемой нейронной сетью разделяющей поверхности или функции регрессии, что влечет за собой и худшие обобщающие способности нейросети. Вопрос об исключении избыточных элементов из нейросети при разработке конструктивных алгоритмов практически не ставится – приходится после создания-обучения сети дополнительно использовать те или иные стандартные алгоритмы редукции/упрощения (pruning) нейросети, заключающиеся в циклическом выполнении следующих шагов: оценивание важности или информативности элементов и сигналов в сети, исключение наименее важных, дообучение нейросети. Этап упрощения, или, вернее, полной или частичной переадаптации нейросети (т.к. конструктивные алгоритмы на каждом шаге наращивания структуры сети обучают единственный добавляемый нейрон или еще и те нейроны, на которые пойдет сигнал с добавляемого, фиксируя-«замораживая» при этом все остальные элементы нейросети – в этом в первую очередь и заключается причина субоптимального и избыточного набора весов синапсов сети при использовании конструктивных алгоритмов) удлиняет процедуру синтеза сети и может всё-таки потребовать участия пользователя в этом процессе.

Случайный поиск или генетические алгоритмы [7] могут в качестве оптимизируемой фитнес-функции использовать явный расчет характеристик обобщающих способностей нейросети или оценку этих способностей. Т.е. при обучении нейросети как особи генетического алгоритма используется традиционная минимизация ошибки обучения методом обратного распространения, но ранжирование особей и отсев неэффективных могут производиться на основе расчета или оценивания ошибок обобщения нейросетей. Конструктивные же алгоритмы не используют оценок или явного расчета обобщающих способностей.

Целью настоящей работы является разработка и исследование нового конструктивного алгоритма синтеза структуры многослойной нейронной сети, явно решающего одновременную проблему достижения наилучших или, по крайней мере, высоких обобщающих свойств модели и позволяющего учитывать некоторые предпочтения пользователя к свойствам финальной нейросети. Набор операций, модифицирующих структуру сети, расширен по сравнению с традиционными конструктивными методами, в которых используется только добавление очередного нейрона в нейросеть (правда, на каждой эпохе могут создаваться и тестироваться несколько нейронов-кандидатов, обладающих разными нелинейными функциями или встраиваемых в разные слои нейросети, и наилучший из этих нейронов может выбираться для финальной модификации структуры сети – но этим число операций модификации структуры сети в конструктивных алгоритмах и ограничено).

#### КОНСТРУКТИВНАЯ СХЕМА СИНТЕЗА МНОГОСЛОЙНОГО ПЕРСЕПТРОНА

При предположениях о репрезентативности обучающей выборки, возможной исходной избыточности набора независимых признаков задачи и старте синтеза структуры сети с минимального размера в настоящей работе в качестве меняющихся нейросетевую структуру операций предлагаются:

1. удаление наименее информативного входного сигнала нейросети;
2. добавление нейрона в сеть (создание и обучение сети увеличенного размера, замещающей исходную, или использование одного шага конструктивного алгоритма роста сети как способа одновременного автоматического нахождения того слоя нейросети, рост числа нейронов в котором приведет к максимальному улучшению точности решению задачи);
3. синтез и подача на вход сети нового независимого признака, например, нелинейной комбинации значений подмножества исходных независимых признаков задачи;
4. редукция некоторого числа избыточных синапсов или нейронов нейросети.

В п.2 возможны все исследованные к настоящему моменту реализации алгоритмов тестирования различных вариантов добавления нейронов и выбора наилучшего из нейронов-кандидатов для каждой эпохи. Для нейросетей с радиальными базисными функциями нейронов операция добавления нейрона может замещаться операцией «расщепления» одного из уже имеющихся в нейросети нейронов – алгоритм [8] позволяет вычислять хорошее начальное приближение для значений весов синапсов обоих нейронов, получаемых при «расщеплении» некоторого.

В п.3 возможны варианты как полного переобучения сети при добавлении нового входного сигнала на входной, промежуточные и/или выходной слои сети, так и комбинация операции п.3 с операцией п.2 добавления нового нейрона в сеть (в последнем случае новый сигнал подается только на новый, добавляемый и обучаемый нейрон, не затрагивая остальные нейроны сети и не требуя дообучения всей ранее достигнутой структуры сети).

Одна и та же структуромодифицирующая операция может применяться не одну, а несколько эпох синтеза структуры нейросети подряд. Переключение с текущей

операции на другую происходит:

- a) при достижении асимптоты или локального минимума критериев Бартлетта [9] или Мураты-Амари [10], характеризующих обобщающие свойства модели (при достижении минимума прогностической ошибки обобщения выполняется переключение на операции, снижающие избыточность нейросети; для условий старта синтеза структуры сети не с минимальной модели в набор операций и введен п.4 для удаления наименее «значимого» нейрона из нейросети;
- b) при превышении ошибкой обобщения (рассчитанной на независимой тестовой выборке или на основе критериев [9,10]) заданного пользователем максимально допустимого уровня ошибок.

В коридоре между значениями максимально допустимых ошибок обучения или обобщения и нулевым уровнем таких ошибок и ведется адаптация структуры нейромодели при заданных критериях вторичной оптимизации, например, требовании минимизации числа независимых признаков, минимизации числа нейронов и т.д.

Таким образом, реализуется в некотором роде покоординатный спуск в пространстве структуродействующих операций. При этом отдельные операции реализуют снижение явной или оцененной ошибки обобщения нейронной сети, а другие – снижение пользовательских критериев вторичной оптимизации (например, критериев размера нейросети или числа входов в ней) при допущении одновременного роста величин ошибки обобщения до неопредельных значений.

## РЕЗУЛЬТАТЫ ЭКСПЕРИМЕНТОВ

Исследовано чередование этапов удаления неинформативных признаков и наращивания размеров нейросетей (т.е. операций 1,2 в вышеприведенном списке) для задач *AnnThyroid*, *OptDigits*, *PenDigits* и *Satellite* из Machine Learning Repository [11] – архива задач для апробации алгоритмов обучения с учителем. Критериями использования данных четырех задач были избыточность набора независимых признаков и наличие отдельных тестовых выборок, снимающих проблему задания способа деления выборки на обучающую и тестовую части.

Удаление неинформативных признаков – входных сигналов нейронной сети – может выполняться двумя различными способами:

- удаление наименее информативного входного сигнала в обученной нейросети, которая сама оценивает информативность признаков. Это методы [12-20]; также здесь могут быть применены математические идеи методов, направленных на удаление незначимых нейронов/синапсов нейросети (см. список таких работ в [21]). После удаления наименее значимого входного сигнала нейросеть при необходимости доучивается на обучающей выборке. Для следующего далее пункта стоит отметить, что процедура субъективного, по «мнению» сети, удаления наименее информативного признака реально распадается на два возможно независимых по алгоритмам этапа – оценку информативности признаков и реальное удаление некоторого входного сигнала из нейросети (возможно, с дообучением последней).
- внешнее по отношению к нейросети ранжирование информативности признаков – подобные методы и алгоритмы перечислены в обзорах [22,23]. При этом нейронная сеть может создаваться заново на новом наборе признаков, полученном путем исключения наименее информативного признака из текущего набора, либо к текущему набору независимых признаков нейросети может применяться операция физического удаления наименее информативного, по указанию внешнего алгоритма, входного сигнала с дообучением нейросети.

Выбор конкретного способа осуществляет пользователь исходя из своих предпочтений, и/или реализованности нужных алгоритмов в программе-нейроимитаторе. В работе был

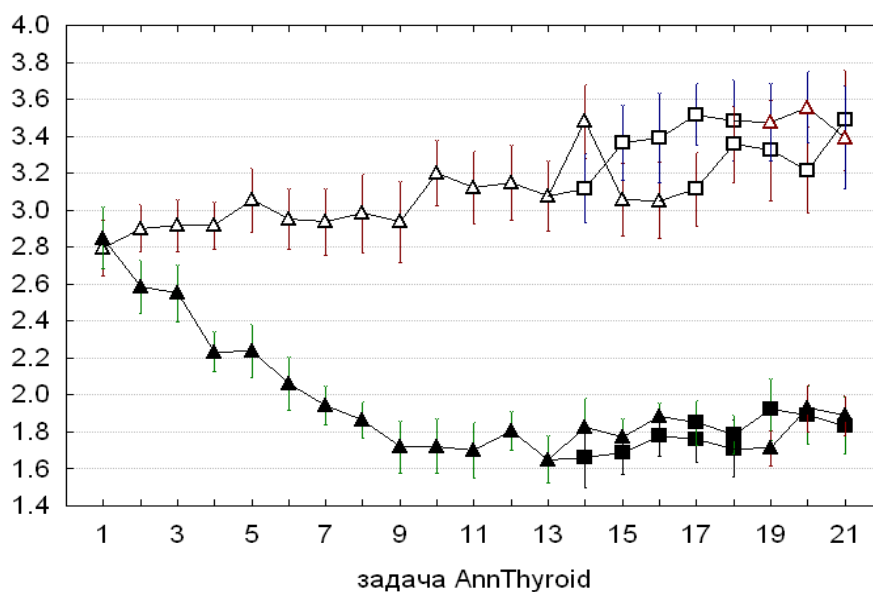
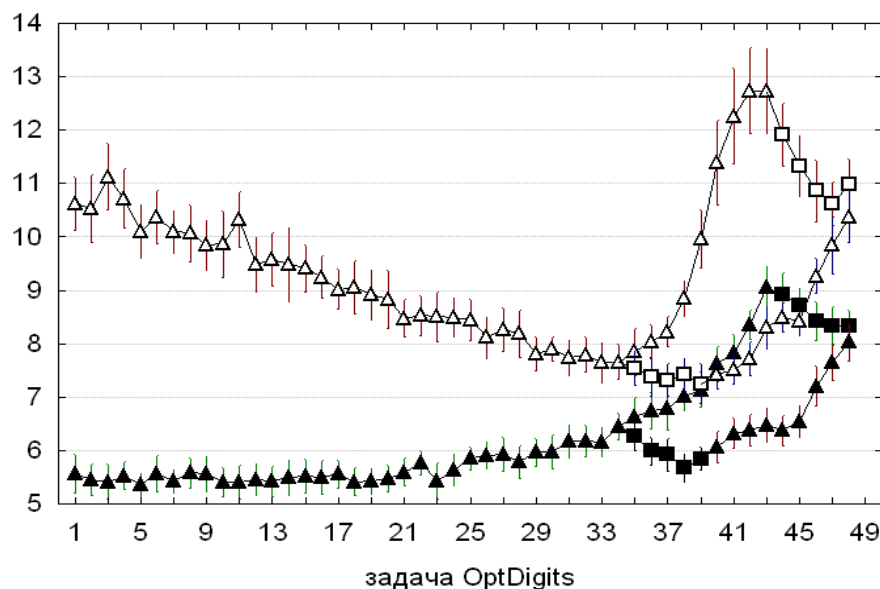
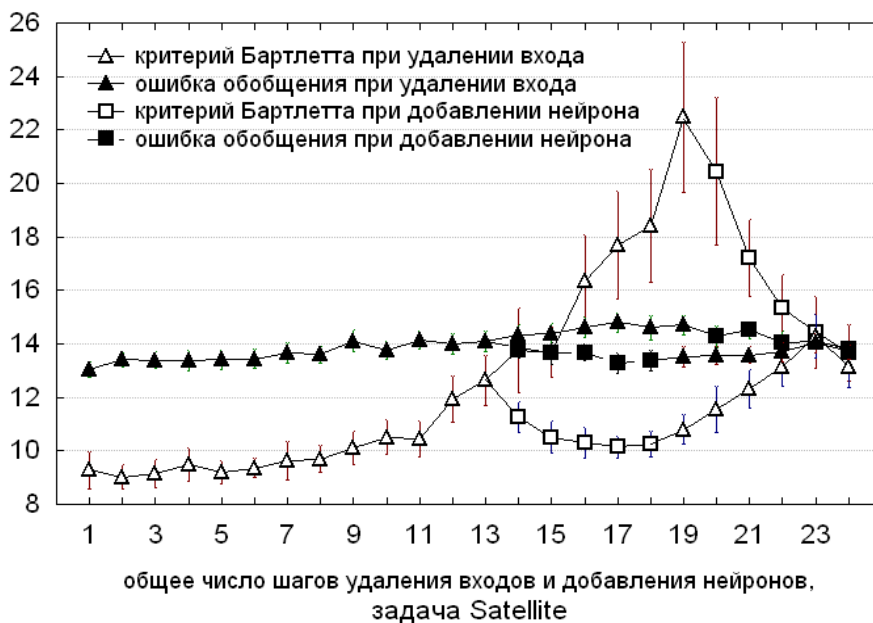
использован первый вариант.

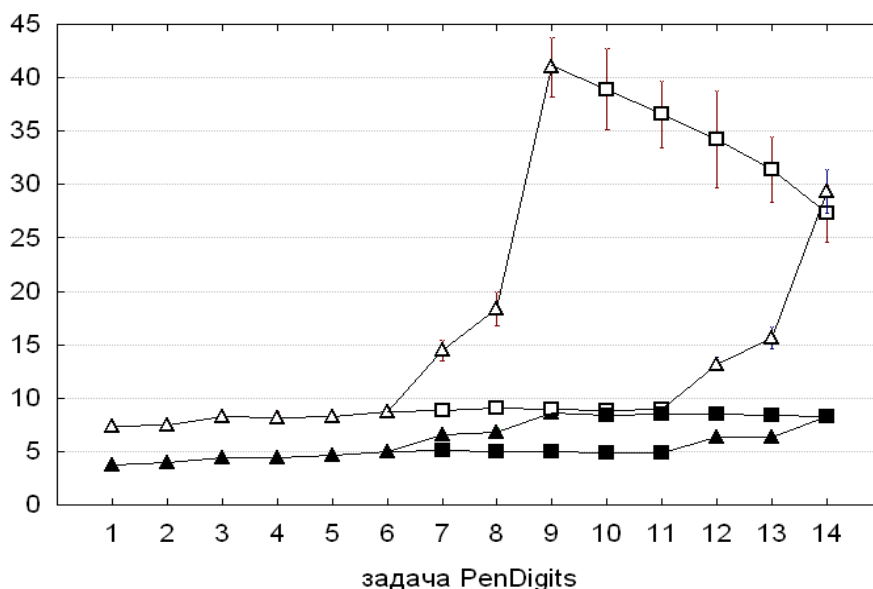
В качестве стартовых взяты нейросети с одним скрытым слоем из 15 или 20 сигмоидных нейронов – такие размеры обеспечивали некоторую «приемлемую» стартовую точность (вернее, точности обучения и обобщения) решения задач, которую затем следовало не сильно ухудшить при сокращении малоинформативных входных сигналов сети. Обучение проводилось методом сопряженных градиентов (над традиционным способом расчета градиента через процедуру обратного распространения ошибки был надстроен метод оптимизации – метод сопряженных градиентов – и процедура параболического поиска оптимального шага на каждой итерации обучения), использовалась целевая функция вида «расстояние до множества» для задач классификации с учителем. Рост размера сетей прекращался после добавления 5 нейронов; для изучения инвариантности результатов к определенным цепочкам действий число последовательных шагов каждой операции могло фиксироваться – при наступлении моментов необходимости смены воздействующей на структуру сети операции изучались альтернативные цепочки «редукция числа входов → наращивание размера сети» и «наращивание размера сети → редукция числа входов», поэтому общее число редуцированных после некоторого момента времени входов тоже в итоге сводилось к единому для каждой задачи значению. Все эксперименты проводились в авторской программе-нейроимитаторе NeuroPro.

На рисунках представлены средние значения с доверительными интервалами (получены по 25 пробам – обучением нейронных сетей с разными стартовыми генерациями значений весов синапсов) для **явно рассчитываемых ошибок обобщения** на тестовых выборках, в виде % неправильно решенных примеров, и для значений критерия Бартлетта, **косвенно оценивающих обобщающие способности** нейросети. Значения критерия Бартлетта перемасштабированы для более наглядного сравнения с графиками ошибок обобщения, т.к. используемое средство построения графиков не позволило ввести вторую ось ординат. Значения показателей отклонены на рисунках по вертикальной оси. По горизонтальной оси указан порядковый номер шага операции, а структуродействующие операции (удаление входного сигнала нейросети или добавление нейрона в нейросеть) обозначены разными маркерами. Две альтернативные цепочки действий («редукция числа входов → наращивание размера сети» и «наращивание размера сети → редукция числа входов») формируют для графиков ошибки обобщения и графиков значений критерия Бартлетта «петли», похожие на гистерезисные. Цепочка «редукция числа входов → наращивание размера сети» порождает единственный момент смены одной структуродействующей операции на другую, цепочка «наращивание размера сети → редукция числа входов» – два таких момента (переключение на добавление нейронов после начального этапа удаления избыточных входов, без фиксации длительности этого первого этапа, и переключение с операции роста сети обратно на удаление избыточных входов).

### ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ ЭКСПЕРИМЕНТОВ

Наблюдается хорошее совпадение качественного поведения графиков ошибок обобщения, явно рассчитанных по тестовым выборкам, и графиков значений критерия Бартлетта [9]. Это позволяет использовать данную схему при отсутствии независимой тестовой выборки – путем отбора моделей и моментов переключения между меняющимися структурами операциями только по значениям критериев [9,10] или подобных им критериев, дающих оценку обобщающих свойств модели только через анализ её внутренних характеристик. Эффективность и стабильность оценочного критерия Бартлетта демонстрировалась автором и в работе [24].





Наблюдается инвариантность определенных цепочек действий – так, последовательное удаление  $N$  входов сети и затем добавление  $M$  нейронов бывает эквивалентно обратной цепочке первоначального добавления  $M$  нейронов и последующего удаления  $N$  входов. Эквивалентность здесь понимается в статистическом смысле, как невозможность подтверждения гипотезы о различии средних значений ошибок обобщения для финальных состояний. Однако, в общем случае, из-за приближенных методов оценки информативности входных сигналов (эти методы основаны, например, на использовании только первых производных тейлоровского разложения, т.к. их можно быстро посчитать методом обратного распространения ошибки [1,2,7]), эквивалентность может и не достигаться.

Возможно использование технологии и для стартовой ситуации, нарушающей требование по минимально необходимой точности, например, при старте синтеза нейронной сети с минимального размера: из набора структуровоздействующих операций выбирается та, которая на пробном шаге даёт наибольшее увеличение точности решения задачи, и далее выполняются шаги модификации структуры сети с использованием именно этой операции, а при достижении локального минимума ошибки обобщения или оценки таковой ошибки, лежащего ниже значения необходимой точности, может произойти переключение на иную операцию и затем будет осуществляться движение в коридоре между максимально возможной предписанной ошибкой и достигнутой минимальной ошибкой, возможно, с дальнейшим снижением последней.

Возможная практическая нечувствительность обобщающих способностей нейросети к добавлению в сеть нейронов с определенной нелинейной функцией приводит к идее разделения операции наращивания размера сети на альтернативные операции роста при тех или иных видах нелинейных функций (сигмоидная, радиально-базисная,...) нейронов. Понятие нечувствительности характеристик сети (главным образом, обобщающих, а не меморизирующих характеристик) альтернативно эмпирической практике пробного выбора лучшего из нескольких нейронов-кандидатов, отличающихся видом нелинейной функции, при однонейронном наращивании размера сети в методах конструктивного обучения [3-5]. И, к тому же, в данном случае выбранная «лучшая» нелинейность нейронов будет использоваться не только на текущем шаге роста, но и на последующих шагах роста сети до момента необходимости переключения на иную структуровоздействующую операцию (это снижает вычислительные затраты предлагаемого алгоритма), возможно, и на операцию

добавления нейронов с иной нелинейностью.

Полученные в задачах OptDigits и AnnThyroid противоположные тенденции изменений ошибок обобщения и критерия Бартлетта для начального этапа сокращения неинформативных входов можно объяснить только сравнительной простотой этого критерия и возможностью уточнения схемы для ситуации с избыточным числом неинформативных признаков (когда могут наличествовать либо негативно действующие на точность обобщения ложные корреляции независимых признаков с требуемым от сети ответом, либо существовать-таки полезная возможность фильтрации шума при усреднении значений нескольких зашумленных признаков).

Вычислительные затраты, связанные с накоплением статистики для каждой пробной ситуации (характеризуемой в описанных экспериментах парой значений «число нейронов – число признаков на входе сети»), сознательно увеличены при проведении экспериментов – тест 25 нейросетей в каждой пробе реально избыточен даже при необходимости явной формальной проверки статистической гипотезы о различии средних значений эффектов для альтернативных операций или смежных эпох синтеза сети. Более того, такие затраты не являются имманентными только для предлагаемого метода, т.к. сбор подобной статистики (обучение и тестирование нескольких нейросетей), особенно в задачах с непредставительной обучающей выборкой, может требоваться и генетическим алгоритмам, и ручному поиску в случае больших разбросов результатов и невозможности из-за этого увидеть четкое положение оптимума при единичных пробах каждой исследуемой конфигурации. Для выборок же избыточного размера локализация оптимума в серии однократно опробованных вариантов обычно не представляет затруднения (пример см. в [25]).

## ВЫВОДЫ

В работе предложен конструктивный алгоритм синтеза оптимальной структуры многослойного персептрона в задачах обучения с учителем. Алгоритм позволяет задавать предпочтения пользователя к виду финальной нейронной сети – например, минимизировать число нейронов в сети или число её входных сигналов. Эти предпочтения реализуются путем использования в алгоритме отдельных структуродействующих операций и/или предпочтения тех из них, которые в случаях равной эффективности позволяют достичь установленных пользователем требований. Сделанный при разработке алгоритма и далее в ходе экспериментов акцент на проверку возможности использования оценок обобщающих способностей нейросети позволяет использовать метод в случаях отсутствия независимых тестовых выборок или при недостаточности размера выборки для возможности её разделения на обучающую и тестовую части. Схема выбора воздействующих на структуру сети операций в первую очередь по значениям ошибок обобщения, и только потом (например, при равенстве ошибок обобщения для пробных шагов различных операций) по соответствию результатов предпочтениям пользователя позволяет явно и целенаправленно максимизировать прогностические способности нейросети в ходе синтеза последней.

Предложенный метод допускает автоматизацию, позволяет пользователю-неспециалисту находить структуру нейросети, максимизирующую точность обобщения при одновременной вторичной оптимизации по размеру сети, а также по числу независимых признаков. По гибкости и эффективности описанная схема может превзойти алгоритмы автоматического поиска оптимальной структуры сети, реализованные в стандартных нейропакетах типа Statistica Neural Networks.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Хайкин С. *Нейронные сети. Полный курс*. М.: Вильямс, 2006. – 1104с.
2. Осовский С. *Нейронные сети для обработки информации*. М.: ФизС, 2003. – 344с.
3. Fahlman S., Lebiere C. *The cascade correlation architecture* / Advances in Neural Information Processing Systems 2 (1989). Morgan Kaufmann, 1990. – pp.524-532.
4. Campbell C. *Constructive learning techniques for designing neural network systems* / Neural Network Systems and Applications (C.Leondes ed.), Academic Press, 1997.
5. Kwok T., Yeung D. *Constructive algorithms for structure learning in feedforward neural networks for regression problems* / IEEE Trans. Neural Networks, 1999. Vol.8, №3. – pp.630-645.
6. Kwok T., Yeung D. *Objective functions for training new hidden units in constructive neural networks* / IEEE Trans. Neural Networks, 1999. Vol.8, №5. – pp.1131-1148.
7. Рутковская Д., Пилиньский М., Рутковский Л. *Нейронные сети, генетические алгоритмы и нечеткие системы*. М., 2004. – 452с.
8. Wynne-Jones M. *Node splitting: A constructive algorithm for feed-forward neural networks* / Neural Computing & Application, 1993. Vol.1. – pp.17-22.
9. Bartlett P.L. *For valid generalization, the size of the weights is more important than the size of the network* / Advances in Neural Information Processing Systems 9 (1996). MIT Press, 1997. – pp.134-140.
10. Murata T., Yoshizawa S., Amari S. *Learning curves, model selection and complexity of neural networks* / Advances in Neural Information Processing Systems 5 (1992). Morgan Kaufmann, 1993. – pp.607-614.
11. <http://www.ics.uci.edu/~mlern/MLRepository.html>
12. Ruck D.W., Rogers S.K., Kabrisky M. *Feature selection using a multilayer perceptron* / Journal of Neural Network Computing, 1990. Vol.2, №2. – pp.40-48.
13. Priddy K.L., Rogers S.K., Ruck D.W., Tarr G.L., Kabrisky M. *Bayesian selection of important features for feedforward neural networks* / Neurocomputing, 1993. Vol.5. – pp.91-103.
14. Belue L.M., Bauer K.W. Jr. *Determining input features for multilayer perceptron* / Neurocomputing, 1995. Vol.7. – pp.111-121.
15. Cibas T., Fogelman-Soulie F., Gallinari P., Raudys S. *Variable selection with neural networks* / Neurocomputing, 1996. Vol.8, №12. – pp.223-248.
16. Rossi F. *Attribute suppression with multi-layer perceptron* / Proc. CESA Multiconference – Symposium on Robotics and Cybernetics. Lille, France, 1996. – pp.542-547.
17. Zurada J.M., Malinowski A., Usui S. *Perturbation method for deleting redundant inputs of perceptron networks* / Neurocomputing, 1997. Vol.14. – pp.177-193.
18. Rossi F. *Geometrical selection of important inputs with feedforward neural network* / Proc. ICANNGA, 1997.
19. Leray P., Gallinari P. *Feature selection with neural networks* / Behaviormetrika, spec. issue on Analysis of Knowledge Representation in Neural Network Models, 1998. Vol.26, №1.
20. Castellano G., Fanelli A.M. *Variable selection using neural-network models* / Neurocomputing, 2000. Vol.31. – pp.1-13.
21. Царегородцев В.Г. *Упрощение нейронных сетей – цели, идеи и методы* // Нейрокомпьютеры: разработка, применение. 2002, №4. – С.5-13.
22. Guyon I., Elisseeff A. *An introduction to variable an feature selection* / Journal of Machine Learning Research, 2003. Vol.3. – pp.1157-1182.
23. Yu L., Liu H. *Efficient feature selection via analysis of relevance and redundancy* / Journal of Machine Learning Research, 2004. Vol.5. – pp.1205-1224.
24. Царегородцев В.Г. *Определение оптимального размера нейросети обратного распространения через сопоставление средних весов синапсов* // Материалы XIV Международной конференции по нейрокибернетике, Ростов-на-Дону, 2005. Т.2. – С.60-64.  
[http://www.neuropro.ru/mypapers/rostov05\\_2.pdf](http://www.neuropro.ru/mypapers/rostov05_2.pdf)
25. Царегородцев В.Г. *Оптимизация свойств экспертов boosting-коллектива с использованием кривых обучения* // Вычислительные технологии, Т.9 - Вестник КазНУ им. Аль-Фараби, Серия математика, механика, информатика, №3 (42). (Совм. выпуск). Часть IV. Алматы-Новосибирск, 2004. – с.213-218.  
[http://www.neuropro.ru/mypapers/krasneuu04\\_2.pdf](http://www.neuropro.ru/mypapers/krasneuu04_2.pdf)