

УДК 004.93

Модели критериев сравнения нейронных и нейро-нечетких сетей в задачах диагностики и классификации образов

Субботин С.А.

Запорожский национальный технический университет,
subbotin@zntu.edu.ua

Abstract

Subbotin S.A. Models of neural and neuro-fuzzy network comparison criteria in the tasks of diagnostics and pattern classification. The complex of criteria for an estimation of properties artificial neural and neuro-fuzzy networks is proposed. It includes criteria of variety, overfitting, elasticity, equifinality, stability to a noise, emergency, and also set monotonicity for a neural model construction. The application of offered criteria in practice allows to automatize the process of a construction, analysis and comparison of neural models for problem solving of diagnostics and pattern classification.

Введение

В настоящее время достаточно широко применяемым на практике классом инструментальных средств при решении задач технической диагностики и классификации образов являются искусственные нейронные и нейро-нечеткие сети, представляющие собой однородные параллельные иерархические вычислительные структуры.

Известно достаточно много различных видов нейромоделей и методов их обучения [1-4]. Поэтому на практике возникает задача сравнения и выбора лучшей нейромодели из имеющихся. Однако эта задача, как правило, решается только путем сравнения достигнутой точности (ошибки), а также скорости обучения и работы нейромоделей [1].

Ранее в [5, 6] автором были предложены критерии, позволяющие оценить сложность, логическую прозрачность (интерпретируемость), избыточность и вариативность нейромоделей. В [7] предложены критерии сложности аппроксимации выборок нейромоделями.

Однако данный перечень критериев отражает лишь малую часть свойств, которыми обладают нейромодели. Поэтому представляется целесообразным расширить перечень рассматриваемых свойств нейромоделей.

Целью данной работы являлось создание моделей критериев для анализа свойств и сравнения нейромоделей.

1 Постановка задачи

Пусть задана обучающая выборка $\langle x, y \rangle$, где $x = \{x^s\}$, $x^s = \{x^s_j\}$, $y = \{y^s\}$, $s = 1, 2, \dots, S$, $j = 1, 2, \dots, N$, x^s_j – s -ый экземпляр выборки, x^s_j – значение j -го признака s -го экземпляра,

S – число экземпляров выборки, N – число признаков, y^s – значение выходного признака, сопоставленное s -му экземпляру выборки, на основе которой синтезирована нейронная или нейро-нечеткая сеть.

Поскольку наиболее широко используемым типом сетей являются слоистые сети прямого пространства, будем характеризовать сети кортежем:

$$\langle M, \{N_\eta\}, \{ \langle w_j^{(\eta,i)}, \varphi^{(\eta,i)}, \psi^{(\eta,i)} \rangle \} \rangle,$$

где M – число слоев сети, N_η – количество нейронов в η -ом слое сети, $w_j^{(\eta,i)}$ – весовой коэффициент j -го входа i -го нейрона η -го слоя, $\varphi^{(\eta,i)}$ – дискриминантная функция i -го нейрона η -го слоя, $\psi^{(\eta,i)}$ – функция активации i -го нейрона η -го слоя.

Также обозначим: N_n – число нейронов в сети, $\Phi(i)$, $\Psi(i)$ – соответственно, дискриминантная и активационная функции i -го нейрона (при сплошной нумерации нейронов сети), $w_{i,j}$ – вес связи между i -ым и j -ым нейронами сети (если связь отсутствует, примем: $w_{i,j} = 0$), где $i, j = 1, 2, \dots, N_n$.

Для автоматизации сравнительного анализа нейромоделей необходимо разработать набор показателей, а также методы их расчета, отражающие важнейшие свойства нейромоделей.

Задачами данной работы является создание критериев для оценивания таких свойств нейромоделей, как: разнообразие, переобученность, эластичность, эквифинальность, устойчивость к шуму, эмерджентность, а также монотонность выборок, используемых для построения нейромоделей.

2 Свойства, определяемые обучающей выборкой

Монотонность выборки согласно [8] определяется как свойство выборки удовлетворять условию:

$$\forall s, p = 1, 2, \dots, S: x^s \leq x^p \rightarrow y^s < y^p.$$

Определим показатель монотонности i -го выхода по j -му входу для обучающей выборки $\langle x, y \rangle$ как:

$$I_{\text{мон}}^{i,j} = \frac{1}{S(S-1)} \sum_{s=1}^S \sum_{p=1}^S \{1 | x_j^s \leq x_j^p, y_i^s \leq y_i^p, s \neq p\}.$$

Показатель монотонности выборки определим как:

$$I_{\text{мон}} = \frac{1}{N_M N S(S-1)} \sum_{i=1}^{N_M} \sum_{j=1}^N \sum_{s=1}^S \sum_{p=1}^S \{1 | x_j^s \leq x_j^p, y_i^s < y_i^p, s \neq p\}.$$

Показатель монотонности выборки будет равен единице для монотонной выборки, и нулю – для немонотонной выборки. Очевидно, что чем выше уровень монотонности выборки, тем проще осуществить разделение выборки на классы и тем более простую нейросеть можно выбрать для решения задачи.

Разнообразие является одной из важнейших характеристик систем и определяется числом различных состояний системы. В соответствии с законом "необходимого разнообразия" У. Р. Эшби [9], создавая систему, способную справиться с решением проблемы, обладающей определенным, известным разнообразием (сложностью), нужно обеспечить, чтобы система имела еще большее разнообразие (знания методов решения), чем разнообразие решаемой проблемы, или была способна создать в себе это разнообразие (владела бы методологией, могла разработать методику, предложить новые методы решения проблемы) [9].

Для генеральной совокупности при неизвестных распределениях признаков условно оценим предельное разнообразие как:

$$I_{\text{div}}(X, Y) = \left(\prod_{i=1}^{N_M} \frac{(y_i^{\max*} - y_i^{\min*})}{\lambda_i^*} \right) \left(\prod_{j=1}^N \frac{(x_j^{\max*} - x_j^{\min*})}{\lambda_j^*} \right),$$

где λ_j – максимальное количество десятичных разрядов, которое может быть использовано для фиксации значений j -го признака (определяется возможностями измерительной аппаратуры и особенностями задачи); $y_i^{\max*}, y_i^{\min*}$ – соответственно, максимальное и минимальное возможные значения i -го выходного признака; $x_j^{\max*}, x_j^{\min*}$ – соответственно, максимальное и минимальное возможные значения j -го входного признака.

Для обучающей выборки будем определять абсолютное разнообразие как:

$$I_{\text{div}}(x, y) = (N_M + N) \sum_{s=1}^S \left(1 - \prod_{p=s+1}^S \left(1 - \prod_{j=1}^N |x_j^s - x_j^p| = 0 \right) \right) = 0, \\ x \subset X, y \subset Y,$$

где $\langle X, Y \rangle$ – генеральная совокупность, из которой извлекается выборка $\langle x, y \rangle$, λ_j – количество десятичных разрядов, используемое для представления значений j -го признака в ЭВМ (на практике определяется типом данных и разрядной сеткой ЭВМ).

Для синтезируемой нейросетевой модели net (для общего случая полносвязной сети с внешним входом и собственными обратными связями нейронов) определим показатель предельного разнообразия как:

$$I_{\text{div}}(net) = \frac{NN_{\text{н.}}^{\max} \sum_{i=1}^{N_{\text{н.}}^{\max}} \vartheta_{np}(\varphi(i)) \vartheta_{np}(\psi(i))}{\text{round} \left(\frac{w^{\max} - w^{\min}}{\Delta w} \right)},$$

где $N_{\text{н.}}^{\max}$ – максимально возможное количество нейронов в сети net , $\vartheta_{np}(element)$ – характеристика пластичности функционального элемента $element$ нейрона (будем полагать $\vartheta_{np}(element)$ равным числу возможных состояний элемента $element$: для дискриминантной функции i -го нейрона $\vartheta_{np}(\varphi(i))$ будет равняться числу возможных видов дискриминантных функций, которые могут быть заданы для данного нейрона; для функции активации i -го нейрона $\vartheta_{np}(\psi(i))$ будет равняться числу возможных видов функций активации, которые могут быть заданы для данного нейрона), $\vartheta_{np}^{\max}(\varphi), \vartheta_{np}^{\max}(\psi)$ – соответственно, максимальные характеристики пластичности дискриминантных и активационных функций среди всех нейронов сети, w^{\max}, w^{\min} – соответственно, максимальное и минимальное возможные значения весов сети, Δw – минимально возможное изменение веса с учетом разрядности вычислительной сетки ЭВМ, round – функция округления к ближайшему целому числу.

На основе введенных абсолютных показателей предельного разнообразия определим относительные показатели:

Для обучающей выборки определим показатель разнообразия по отношению к генеральной совокупности:

$$I_{\text{div}}(x, X, y, Y) = \frac{I_{\text{div}}(x, y)}{I_{\text{div}}^*(X, Y)}.$$

Для нейронной сети net определим показатель разнообразия по отношению к обучающей выборке:

$$I_{\text{div}}(net, \langle x, y \rangle) = \frac{I_{\text{div}}(net)}{I_{\text{div}}(x, y)}.$$

Для нейронной сети net определим показатель разнообразия по отношению к генеральной совокупности:

$$I_{\text{div}}(net, X, Y) = \frac{I_{\text{div}}(net)}{I_{\text{div}}^*(X, Y)}.$$

Переобученність розпізнаючої моделі net на навчаючій вибірці x відносно тестової вибірки $x_{\text{тест.}}$, $x_{\text{тест.}} \neq x$, в [11] визначають як:

$$\delta_{net}(x, x_{\text{тест.}}) = V(net, x_{\text{тест.}}) - V(net, x),$$

$$h(net, x) = \frac{1}{S} \sum_{x=1}^S E(net, x^s),$$

де $h(net, x)$ – частота помилок моделі net на вибірці x (в задачах класифікації: $E(net, x^s) = \{1 \mid net(x^s) \neq y^s\}$, в задачах оцінювання: $E(net, x^s) = \{1 \mid \delta \leq |net(x^s) - y^s|\}$, δ – порог помилки).

Поскольку нейромодели могут на выходе определять значения не одной, а нескольких переменных, и порог ошибки для экземпляра на практике не всегда может быть задан, а также для большей универсальности и единообразия при решении различных задач определим:

$$E(net, x^s) = 1 - \exp\left(-\frac{1}{N_M} \sum_{i=1}^{N_M} \left(\frac{\Psi^{(i)}(x^s) - y_i^s}{\max_{s=1,2,\dots,S}(y_i^s) - \min_{s=1,2,\dots,S}(y_i^s)}\right)^2\right).$$

Еластичність функції $y(x)$ по змінній x_j , згідно [11], визначається як:

$$E_{x_j}(y) = \lim_{\Delta x_j \rightarrow 0} \frac{\Delta y}{\Delta x_j} = \left(\lim_{\Delta x_j \rightarrow 0} \frac{\Delta y}{\Delta x_j}\right) \frac{x_j}{y},$$

де $\Delta y = \frac{y(x_j + \Delta x_j) - y(x_j)}{y(x_j)}$, $x_j > 0$, $y > 0$.

Визначимо відносну оцінку еластичності навчаючої вибірки $\langle x, y \rangle$ з нормуванням для вихідної змінної y_i по вхідній змінній x_j як:

$$E_{x_j, y_i}(\langle x, y \rangle) = \frac{\sum_{s=1}^S \tilde{x}_j^s}{2S} \times \max_{\substack{s=1,2,\dots,S; \\ p=s+1,\dots,S}} \left\{ \frac{\max(\tilde{y}_i^s, \tilde{y}_i^p) - \min(\tilde{y}_i^s, \tilde{y}_i^p)}{\min(\tilde{y}_i^s, \tilde{y}_i^p)} \left| \tilde{x}_j^s - \tilde{x}_j^p \right| > 0 \right\},$$

$$\tilde{x}_j^s = 1 + \frac{x_j^s - \min_{p=1,2,\dots,S}(x_j^p)}{\max_{p=1,2,\dots,S}(x_j^p) - \min_{p=1,2,\dots,S}(x_j^p)},$$

$$\tilde{y}_i^s = 1 + \frac{y_i^s - \min_{p=1,2,\dots,S}(y_i^p)}{\max_{p=1,2,\dots,S}(y_i^p) - \min_{p=1,2,\dots,S}(y_i^p)}.$$

Відносну еластичність по змінній x_j апроксимуючої функції $y_i = net(x)$, реалізуємої нейронною мережею net на i -ом виході y_i , навчаючої на основі навчаючої вибірки $\langle x, y \rangle$, визначимо як:

$$E_{x_j}(net, y_i) = \frac{1}{2S} \sum_{s=1}^S \left(\frac{\tilde{x}_j^s (\tilde{\Psi}_{(\tilde{x}_j^s + \Delta x_j)}^{(N_M, i)} - \tilde{\Psi}_{(\tilde{x}_j^s)}^{(N_M, i)})}{\Delta x_j (\tilde{\Psi}_{(\tilde{x}_j^s)}^{(N_M, i)})^2} \right),$$

де $\tilde{\Psi}_{(\tilde{x}_j^s)}^{(N_M, i)}$ – розрахункове значення на i -ом виході нейронної мережі net при подачі на її входи нормованих

значень ознак s -го екземпляра; $\tilde{\Psi}_{(\tilde{x}_j^s + \Delta x_j)}^{(N_M, i)}$ – розрахункове значення на i -ом виході нейронної мережі net при подачі на її входи нормованих значень ознак s -го екземпляра, а на j -ий вхід – скорректированного нормованного на Δx_j значення j -го признака s -го екземпляра.

Устойчивість к шуму – властивість нейронних мереж забезпечувати правильну реакцію на вхідний сигнал, що містить шум.

Визначимо показник стійкості навчаючої нейронної мережі к адитивному шуму во вхідному сигналі по j -му входу як:

$$I_{tol_j}^{\ell} = \exp\left(-\frac{1}{2} \sum_{s=1}^S \left((net(x^s) - net_{(j^+)}(x^s))^2 + (net(x_j^s) - net_{(j^-)}(x^s))^2 \right)\right),$$

$$(j^+)x_g^s = \begin{cases} x_g^s, & g \neq j, g = 1, 2, \dots, N; \\ x_g^s + \ell \left(\max_{p=1,2,\dots,S}(x_g^p) - \min_{p=1,2,\dots,S}(x_g^p) \right), & g = j, \end{cases}$$

$$(j^-)x_g^s = \begin{cases} x_g^s, & g \neq j, g = 1, 2, \dots, N; \\ x_g^s - \ell \left(\max_{p=1,2,\dots,S}(x_g^p) - \min_{p=1,2,\dots,S}(x_g^p) \right), & g = j, \end{cases}$$

$$x_j^s = x_j^s - \ell \left(\max_{p=1,2,\dots,S}(x_j^p) - \min_{p=1,2,\dots,S}(x_j^p) \right),$$

де ℓ – заданий рівень шуму, $0 < \ell < 1$.

Показник стійкості навчаючої нейронної мережі к випадковому адитивному шуму во вхідному сигналі визначимо як:

$$I_{tol}^{\ell} = \exp\left(-\frac{1}{2} \sum_{s=1}^S \left((net(x^s) - net_{(+)}(x^s))^2 + (net(x_j^s) - net_{(-)}(x^s))^2 \right)\right),$$

$$+x_j^s = x_j^s + \ell \left(\max_{p=1,2,\dots,S}(x_j^p) - \min_{p=1,2,\dots,S}(x_j^p) \right),$$

$$-x_j^s = x_j^s - \ell \left(\max_{p=1,2,\dots,S}(x_j^p) - \min_{p=1,2,\dots,S}(x_j^p) \right), j = 1, 2, \dots, N,$$

де ℓ – заданий рівень шуму, $0 < \ell < 1$. Для автоматизації процесу визначення ℓ пропонується використовувати вираження:

$$\ell = \min_{j=1,2,\dots,N} \left\{ \frac{\min_{\substack{s=1,2,\dots,S; \\ p=s+1,\dots,S}} \left\{ x_j^s - x_j^p \mid y^s \neq y^p \right\}}{\max_{p=1,2,\dots,S}(x_j^p) - \min_{p=1,2,\dots,S}(x_j^p)} \right\},$$

3 Системні властивості нейронних мереж

Еквіфінальність – закономірність функціонування і розвитку системи, що характеризує її межові можливості системи [12].

Визначимо відносну еквіфінальність нейронної мережі net як

$$I_{ef}(net, \langle x, y \rangle) = \frac{NN_w}{N_H^{\max}(N_H^{\max 2} + N)} \times \exp\left(-\frac{1}{SN} \sum_{s=1}^S \sum_{i=1}^{N_M} (\Psi_{(x^s)}^{(i)} - y_i^s)^2\right),$$

де $\Psi_{(x^s)}^{(i)}$ – розрахункове значення на i -ом виході мережі при подачі на її входи екземпляра x^s .

Относительная эквивиальность будет принимать наибольшее значение (в пределе 1) для тех сетей, которые достигли максимально возможных размеров и связности в процессе синтеза структуры, а также наименьшей ошибки (в пределе 0) в процессе обучения.

Эмерджентность (целостность) – закономерность, проявляющаяся в системе в возникновении, появлении у нее новых свойств, отсутствующих у элементов. Свойство целостности связано с целью, для выполнения которой создается система.

Степень целостности системы в соответствии с [12] определяется как

$$I_{\alpha} = -\frac{C_v}{C_o},$$

где C_o – собственная сложность, представляющая собой суммарную сложность (содержание) элементов системы вне связи их между собой (в случае прагматической информации – суммарную сложность элементов, влияющих на достижение цели); C_v – взаимная сложность, характеризующая степень взаимосвязи элементов в системе (т.е. сложность ее устройства, схемы, структуры).

Применительно к нейросетевой модели определим эмерджентность как

$$I_{\alpha} = -\frac{\sum_{i=1}^{N_n} \sum_{j=1}^{N_n} \vartheta_{\alpha v}(i, j)}{\sum_{j=1}^{N_n} \vartheta_{\alpha o}(j)},$$

где $\vartheta_{\alpha v}(i, j)$ – характеризует наличие связи между i -ым и j -ым нейронами сети ($\vartheta_{\alpha v}(i, j) = 1$, если связь имеется; в противном случае – $\vartheta_{\alpha v}(i, j) = 0$), $\vartheta_{\alpha o}(j)$ – сложность j -го нейрона, которая может быть определена подобно [5] в единицах элементарных операций сложения и умножения.

Заключение

В работе решена актуальная задача автоматизации анализа свойств и сравнения нейросетевых моделей.

Научная новизна работы заключается в том, что впервые предложен комплекс моделей критериев, характеризующих такие свойства нейронных и нейро-нечетких сетей как разнообразие, переобученность, эластичность, эквивиальность, устойчивость к шуму, эмерджентность, что позволяет автоматизировать решение задачи анализа свойств и сравнения нейросетевых и нейро-нечетких моделей при решении задач диагностики и классификации образов.

Работа выполнена как часть госбюджетной темы Запорожского национального технического университета "Информационные технологии автоматизации распознавания образов и принятия решений для диагностики в условиях неопределенности на основе гибридных нечеткологических, нейросетевых и мультиагентных методов вычислительного интеллекта".

Литература

1. Хайкин С. Нейронные сети. Полный курс / С. Хайкин. – М.: Вильямс, 2006. – 1104 с.
2. Борисов В. В. Нечеткие модели и сети / В. В. Борисов, В. В. Круглов, А. С. Федулов. – М.: Горячая линия-Телеком, 2007. – 284 с.
3. Субботін С. О. Неітеративні, еволюційні та мультиагентні методи синтезу нечіткологічних і нейромережних моделей: Монографія / С. О. Субботін, А. О. Олійник, О. О. Олійник; під заг. ред. С. О. Субботіна. – Запоріжжя: ЗНТУ, 2009. – 375 с.
4. Субботін С. О. Подання й обробка знань у системах штучного інтелекту та підтримки прийняття рішень: Навчальний посібник / С. О. Субботін. – Запоріжжя: ЗНТУ, 2008. – 341 с.
5. Субботин С. А. Методика и критерии сравнения моделей и алгоритмов синтеза искусственных нейронных сетей / С. А. Субботин // Радиоелектроніка. Інформатика. Управління. – 2003. – № 2. – С. 109-114.
6. Субботин С. А. О сравнении нейросетевых моделей / С. А. Субботин // Нейроінформатика и ее приложения: Материалы XI Всероссийского семинара, 3-5 октября 2003 г. / Под ред. А. Н. Горбаня, Е. М. Миркеса. – Красноярск: ИВМ СО РАН, 2003. – С. 152-153.
7. Миркес Е. М. Нейроінформатика: Учеб. пособие для студентов / Е. М. Миркес. – Красноярск: ИПЦ КГТУ, 2002. – 347 с.
8. Рудаков К. В. О методах оптимизации и монотонной коррекции в алгебраическом подходе к проблеме распознавания / К. В. Рудаков, К. В. Воронцов // Доклады РАН. – 1999. – Т. 367. – № 3. – С. 314-317.
9. Эшби У. Р. Введение в кибернетику / У. Р. Эшби. – М.: Иностранная литература, 1959. – 432 с.
10. Воронцов К. В. Эффекты расслоения и сходства в семействах алгоритмов и их влияние на вероятность переобучения / К. В. Воронцов [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.machinelearning.ru/wiki/images/0/0e/Voron09roai2008.pdf>
11. Замков О. О. Математические методы в экономике / О. О. Замков, А. В. Толстопятенко, Ю. Н. Черемных. – М.: «Дело и Сервис», 1999. – 366 с.
12. Системный анализ и принятие решений: Словарь-справочник: Учеб. пособие для вузов / Под ред. В.Н. Волковой, В.Н. Козлова. – М.: Высшая школа, 2004. – 616 с.

Поступила в редколлегию 20.12.2009