

УДК 004.032.26

Головко В.А., Крощенко А.А.

УО «Брестский государственный технический университет»

МЕТОД ОБУЧЕНИЯ НЕЙРОННОЙ СЕТИ ГЛУБОКОГО ДОВЕРИЯ И ПРИМЕНЕНИЕ ДЛЯ ВИЗУАЛИЗАЦИИ ДАННЫХ

Головко В.А., Крощенко А.А. Метод обучения нейронной сети глубокого доверия и применение для визуализации данных. В последнее время нейронные сети глубокого доверия являются горячо обсуждаемой темой в области машинного обучения благодаря своей возможности выполнять глубокое иерархическое представление входных данных. Так, первый слой сети может извлечь низкоуровневые признаки, второй слой – признаки более высокого уровня и т.д. В общем случае нейронная сеть глубокого доверия представляет собой перцептрон с большим количеством слоев и позволяет преодолеть ограничения классического многослойного перцептрона благодаря глубокой архитектуре. В данной статье представляется новый метод, называемый REBA, для обучения нейронной сети глубокого доверия на основе ограниченной машины Больцмана (RBM). Эффективность метода REBA демонстрируется на примере визуализации выборки рукописных цифр базы данных MNIST.

Ключевые слова: ограниченная машина Больцмана, нейронная сеть глубокого доверия, визуализация данных, машинное обучение.

Vladimir Golovko, Aliaksandr Kroshchanka. A Method of deep belief neural network learning and application for data visualization. Deep belief neural network has been the hottest topic in domain of machine learning in the last years due to deep hierarchical representation of the input data. So, the first layer could extract low-level features, the second layer could extract higher level features and so on. In general case deep belief neural network represents many-layered perceptron and permits to overcome some limitations of conventional multilayer perceptron due to deep architecture. In this work we propose a new technique called "REBA" for training of deep belief neural network, based on restricted Boltzmann machine. The performance of REBA technique is illustrated for MNIST dataset visualization.

Keywords: Restricted Boltzmann machine, deep belief neural network, data visualization, machine learning.

Введение. Глубокое обучение – это революционная техника в области машинного обучения, которая успешно применяется к решению многих проблем искусственного интеллекта, например, распознавание речи, компьютерное зрение, обработка естественного языка, визуализация данных и т.д. [1-9]. Нейронная сеть глубокого доверия (deep belief neural networks, DBN) [1-4] состоит из множества скрытых слоев и позволяет выполнять глубокое иерархическое преобразование входных данных. До 2006 года в научной среде была приоритетной парадигма, что многослойный перцептрон с одним, максимум двумя скрытыми слоями является более эффективным для нелинейного преобразования входного пространства образов в выходное по сравнению с перцептроном с большим количеством скрытых слоев. Считалось, что перцептрон с более чем двумя скрытыми слоями не имеет смысла применять. Данная парадигма базировалась на теореме, что перцептрон с одним или двумя скрытыми слоями является универсальным аппроксиматором. Другой аспект этой проблемы заключается в том, что все попытки использовать алгоритм обратного распространения ошибки для обучения перцептрона с тремя и более скрытыми слоями не приводили к улучшению решения различных задач. Это связано с тем, что алгоритм обратного распространения ошибки является неэффективным для обучения перцептронов с тремя и более слоями. В 2006 Хинтон (Hinton) предложил «жадный» алгоритм послойного обучения (greedy layer-wise algorithm) [3], который стал эффективным средством обучения нейронных сетей глубокого доверия, которые как уже отмечалось, представляют собой перцептрон с большим количеством слоев. Было показано, что нейронная сеть глубокого доверия имеет большую эффективность нелинейного преобразования и представления данных по сравнению с традиционным перцептроном. Такая сеть осуществляет глубокое иерархическое преобразование входного пространства образов. В данной статье представлен новый метод обучения ограниченной машины Больцмана (RBM) и соответственно нейронной сети глубокого доверия. По сравнению с традиционным подходом - методом, основанным на энергии, который базируется на линейном представлении нейронных элементов, предложенный метод REBA [8,9] позволяет учитывать нелинейную природу нейронных элементов. Данный метод базируется на минимизации среднеквадратичной ошибки реконструкции в скрытом и видимом слоях RBM. Показывается, что классическое правило обучения RBM являются частным случаем предложенного подхода.

Нейронная сеть глубокого доверия и ограниченная машина Больцмана. Рассмотрим существующие исследования в области глубоких нейронных сетей, которые представлены во многих [1-7]. Как уже отмечалось, нейронная сеть глубокого доверия содержит множество скрытых слоев (рис. 1) и осуществляет глубокое иерархическое преобразование входного пространства образов.

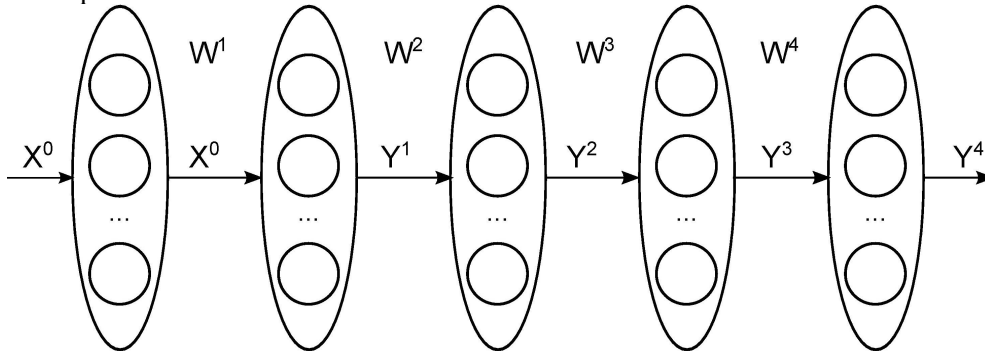


Рис. 1. Нейронная сеть глубокого доверия

Выходное значение j -го нейрона k -го слоя определяется следующим образом:

$$y_j^k = F(S_j^k), \quad (1)$$

$$S_j^k = \sum_{i=1} w_{ij}^k y_i^{k-1} + T_j^k, \quad (2)$$

где F – функция активации нейронного элемента, S_j^k – взвешенная сумма j -го нейрона k -слоя, w_{ij}^k – весовой коэффициент между i -ым нейроном $(k-1)$ -го слоя и j -м нейроном k -го слоя, T_j^k – пороговое значение j -го нейрона k -го слоя.

Для первого (распределительного) слоя

$$y_i^0 = x_i. \quad (3)$$

В матричном виде выходной вектор k -го слоя

$$Y^k = F(S^k) = F(W^k Y^{k-1} + T^k), \quad (4)$$

где W – матрица весовых коэффициентов, Y^{k-1} – выходной вектор $(k-1)$ -го слоя, T^k – вектор пороговых значений нейронов k -го слоя. Если нейронная сеть глубокого доверия используется для классификации образов, то выходные значения сети часто определяются на основе функции активации **softmax**:

$$y_j^F = \text{softmax}(S_j) = \frac{e^{S_j}}{\sum_l e^{S_l}} \quad (5)$$

Процесс обучения нейронных сетей глубокого доверия в общем случае состоит из двух этапов:

1. Предобучение нейронной сети методом послойного обучения, начиная с первого слоя (pre-training). Данное обучение осуществляется без учителя.
2. Настройка синаптических связей всей сети (fine-tuning) при помощи алгоритма обратного распространения ошибки или алгоритма «бодрствования и сна» (wake-sleep algorithm).

Предобучение DBN выполняется на основе ограниченной машины Больцмана (RBM) или автоэнкодера [1-9]. В соответствии с процедурой послойного обучения (greedy layer-wise algorithm), вначале обучается первый слой DBN, используя RBM правило обучения или автоэнкодерный метод и его синаптические связи фиксируются. Затем обучается следующий слой нейронной сети и т.д. В результате такого обучения без учителя можно получить подходящую начальную инициализацию настраиваемых параметров сети глубокого доверия. На заключительном этапе осуществляется точная настройка параметров всей сети при помощи

алгоритма обратного распространения ошибки или алгоритма «бодрствования и сна» (wake-sleep algorithm).

В данной статье рассматривается метод обучения DBN, основанный на ограниченной машине Больцмана. Нейронная сеть глубокого доверия (DBN) может быть представлена как множество ограниченных машин Больцмана. Таким образом, RBM является основной структурной единицей нейронной сети глубокого доверия. Традиционный подход к обучению RBM основывается на энергетической модели и линейном правиле обучения [1-2].

Рассмотрим ограниченную машину Больцмана, которая состоит из двух слоев: видимого и скрытого (рисунок 2).

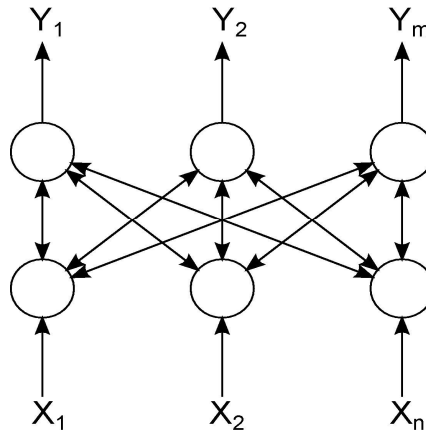


Рис.2. Ограниченная машина Больцмана

В RBM нейроны скрытого слоя являются детекторами признаков, которые выделяют закономерности входных данных. Каждый нейрон имеет двунаправленную связь с другими в соседнем слое. Ограниченная машина Больцмана может генерировать (представить) любое дискретное распределение, если используется достаточное количество нейронов скрытого слоя [5].

RBM является стохастической нейронной сетью, в которой состояния видимых и скрытых нейронов меняются в соответствии с вероятностной версией сигмоидной функции активации:

$$p(y_j | x) = \frac{1}{1 + e^{-s_j}}, s_j = \sum_i^n w_{ij} x_i + T_j \quad (6)$$

$$p(x_i | y) = \frac{1}{1 + e^{-s_i}}, s_i = \sum_j^m w_{ij} y_j + T_i \quad (7)$$

Необходимо отметить, что состояния видимых и скрытых нейронных элементов принимаются независимыми:

$$P(x | y) = \prod_{i=1}^n P(x_i | y) \quad (8)$$

$$P(y | x) = \prod_{j=1}^m P(y_j | x)$$

Таким образом, состояния всех нейронных элементов ограниченной машины Больцмана определяются через распределение вероятностей. Ключевая идея обучения состоит в воспроизведении распределения входных данных на основе состояний нейронов скрытого слоя как можно точнее. Это эквивалентно максимизации функции логарифмического правдоподобия распределения входных данных $P(x)$ путем модификации синаптических связей нейронной сети. Используя этот подход Хинтон [1-4] предложил использовать метод контрастной дивергенции (contrastive divergence, CD) для обучения RBM. Он базируется на сэмплинге Гиббса. В случае CD-1 правило обучения определяется следующим образом:

$$w_{ij}(t+1) = w_{ij}(t) + \alpha(x_i(0)y_j(0) - x_i(1)y_j(1))$$

$$T_i(t+1) = T_i(t) + \alpha(x_i(0) - x_i(1)) \quad (9)$$

$$T_j(t+1) = T_j(t) + \alpha(y_j(0) - y_j(1)).$$

В случае CD-k

$$\begin{aligned} w_{ij}(t+1) &= w_{ij}(t) + \alpha(x_i(0)y_j(0) - x_i(k)y_j(k)) \\ T_i(t+1) &= T_i(t) + \alpha(x_i(0) - x_i(k)) \\ T_j(t+1) &= T_j(t) + \alpha(y_j(0) - y_j(k)). \end{aligned} \quad (10)$$

В этом случае первые слагаемые в правилах обучения характеризуют распределение данных в момент времени $t = 0$, а вторые слагаемые характеризуют реконструированные или генерируемые моделью состояния в момент времени $t = k$. Здесь α - скорость обучения. Из последних выражений видно, что правило обучения ограниченной машины Больцмана минимизирует разницу между оригинальными данными и данными, генерируемыми моделью. Генерируемые моделью данные получаются при помощи сэмплирования Гиббса.

Обучение RBM осуществляется следующим образом: представляется обучающий образ видимому слою нейронов, затем, используя процедуру CD-n, вычисляются бинарные состояния скрытых нейронов, выполняется восстановление состояний видимых нейронов и т.д. После выполнения этих итераций веса и пороги ограниченной машины Больцмана модифицируются. Затем берется следующий слой нейронной сети и конструируются RBM машина. Входными данными для нее являются данные с предыдущего слоя. Происходит обучение и процесс продолжается для всех слоев нейронной сети. В результате такого обучения без учителя можно получить подходящую начальную инициализацию настраиваемых параметров сети глубокого доверия. На заключительном этапе осуществляется точная настройка параметров всей сети при помощи алгоритма обратного распространения ошибки или алгоритма «бодрствования и сна» (wake-sleep algorithm).

Новый метод обучения RBM. В данном разделе рассматривается новый метод обучения RBM. Он основывается на минимизации среднеквадратичной ошибки реконструкции видимых и скрытых образов, которую можно получить, используя итерации сэмплирования Гиббса. По сравнению с традиционным подходом, основанным на минимизации энергии (energy-based method), который базируется на линейном представлении нейронных элементов, предложенный метод позволяет учитывать нелинейную природу нейронных элементов.

Рассмотрим ограниченную машину Больцмана, которую будем представлять в виде трех слоев нейронных элементов [8,9,10]: видимый, скрытый и видимый (рисунок 3).

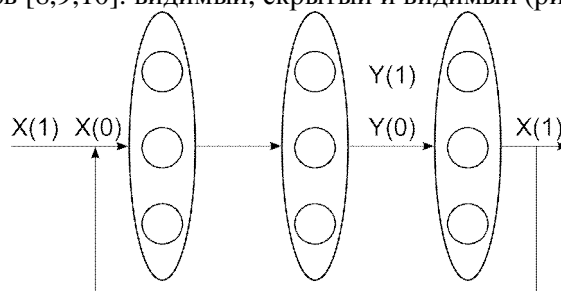


Рис. 3. Представление RBM в виде рециркуляционной нейронной сети

Сэмплирование Гиббса заключается в следующей процедуре. Пусть $x(0)$ входной вектор, который поступает на видимый слой в момент времени 0. Тогда выходные значения нейронов скрытого слоя:

$$y_j(0) = F(S_j(0)), \quad (11)$$

$$S_j(0) = \sum_i w_{ij} x_i(0) + T_j. \quad (12)$$

Инверсный (последний) слой реконструирует входной вектор на основе данных со скрытого слоя. В результате получается восстановленный вектор $x(1)$ в момент времени 1:

$$x_i(1) = F(S_i(1)), \quad (13)$$

$$S_i(1) = \sum_j w_{ij} y_j(0) + T_i. \quad (14)$$

Затем вектор $x(1)$ поступает на видимый слой, и вычисляются выходные значения нейронов скрытого слоя:

$$y_j(1) = F(S_j(1)), \quad (15)$$

$$S_j(1) = \sum_i w_{ij} x_i(1) + T_j. \quad (16)$$

Продолжая данный процесс, можно получить на шаге k

$$y_i(k) = F(S_j(k)), S_j(k) = \sum_i w_{ij} x_i(k) + T_j. \quad (17)$$

$$x_i(k) = F(S_i(k)), S_i(k) = \sum_j w_{ij} y_j(k-1) + T_i. \quad (18)$$

Целью обучения ограниченной машины Больцмана является минимизация суммарной квадратичной ошибки реконструкции данных на скрытом и восстанавливающем слое, которая в случае CD-k определяется следующим образом:

$$E_s = \frac{1}{2} \sum_{l=1}^L \sum_{j=1}^m \sum_{p=1}^k (y_j^l(p) - y_j^l(p-1))^2 + \frac{1}{2} \sum_{l=1}^L \sum_{i=1}^n \sum_{p=1}^k (x_i^l(p) - x_i^l(p-1))^2 \quad (19)$$

В случае CD-1 суммарная квадратичная ошибка

$$E_s = \frac{1}{2} \sum_{l=1}^L \sum_{j=1}^m (y_j^l(1) - y_j^l(0))^2 + \frac{1}{2} \sum_{l=1}^L \sum_{i=1}^n (x_i^l(1) - x_i^l(0))^2 \quad (20)$$

где L количество входных образов. В результате можно доказать следующую теорему [9].

Теорема 1. Максимизация функции правдоподобия распределения данных $P(x)$ в пространстве синаптических связей ограниченной машины Больцмана эквивалентна минимизации суммарной квадратичной ошибки сети в том же пространстве при использовании линейных нейронов.

Эта теорема утверждает, что если мы используем линейную функцию активации для нейронов RBM, то правило обучения CD-k для минимизации среднеквадратичной ошибки восстановления информации на скрытом и инверсном слое будет следующим:

$$\begin{aligned} w_{ij}(t+1) &= w_{ij}(t) + \alpha(x_i(0)y_j(0) - x_i(k)y_j(k)), \\ T_j(t+1) &= T_j(t) + \alpha(y_j(0) - y_j(k)), \\ T_i(t+1) &= T_i(t) + \alpha(x_i(0) - x_i(k)) \end{aligned} \quad (21)$$

Как можно видеть, последние выражения идентичны классическому правилу обучения RBM. Таким образом, классическое правило обучения RBM является линейным. Поэтому, назовем такую машину линейной RBM.

Следствие 1. Линейная ограниченная машина Больцмана с точки зрения обучения эквивалентна автоассоциативной (рециркуляционной) нейронной сети при использовании в ней при обучении сэмплирования Гиббса.

Следствие 2. Для нелинейной ограниченной машины Больцмана правило модификации синаптических связей в случае CD-k будет следующим:

$$\begin{aligned} w_{ij}(t+1) &= w_{ij}(t) - \alpha \left(\sum_{p=1}^k (y_j(p) - y_j(p-1)) x_i(p) F'(S_j(p)) + (x_i(p) - x_i(p-1)) y_j(p-1) F'(S_i(p)) \right) \\ T_j(t+1) &= T_j(t) - \alpha \left(\sum_{p=1}^k (y_j(p) - y_j(p-1)) F'(S_j(p)) \right), \\ T_i(t+1) &= T_i(t) - \alpha \left(\sum_{p=1}^k (x_i(p) - x_i(p-1)) F'(S_i(p)) \right), \end{aligned} \quad (22)$$

Следствие 3. Для нелинейной ограниченной машины Больцмана правило модификации синаптических связей в случае CD-1 будет следующим:

$$w_{ij}(t+1) = w_{ij}(t) - \alpha((y_j(1) - y_j(0))F'(S_j(1))x_i(1) + (x_i(1) - x_i(0))F'(S_i(1))y_j(0)),$$

$$T_i(t+1) = T_i(t) - \alpha(x_i(1) - x_i(0))F'(S_i(1)),$$

$$T_j(t+1) = T_j(t) - \alpha(y_j(1) - y_j(0))F'(S_j(1)).$$
(23)

Таким образом, классическое правило для обучения ограниченной машины является частным случаем предложенного метода.

В данном разделе получено правило обучения для ограниченной машины Больцмана, которое базируются на минимизации квадратичной ошибки восстановления информации в скрытом и видимом слоях. Предложенный метод позволяет учитывать производные нелинейной функции активации для нейронных элементов сети. Показано, что классические выражения для обучения ограниченной машины являются частным случаем предложенного метода, который называется REBA (reconstruction error-based approach).

Эксперименты. Для того, чтобы проиллюстрировать эффективность метода REBA, рассмотрим, задачу визуализации рукописных цифр на основе выборки MNIST. Выборка MNIST содержит 60000 образов рукописных цифр для обучения и 10000 образов для тестирования. Каждый образ представляет собой изображение 28X28 пикселей в градациях серого. Для отображения 784-мерных образов в двумерное пространство признаков, использовался глубокий автоэнкодер с топологией 784-1000-500-250-2.

В среднем слое (узком горлышке) нейронной сети использовалась линейная функция активации. В других слоях применялась сигмоидная функция активации. Для предобучения глубокого автоэнкодера использовался алгоритм послойного обучения на основе RBM и REBA методов. Данная процедура начинается с первого слоя и выполняется без учителя. После этого выполняется обучение всей нейронной сети, используя алгоритм обратного распространения ошибки.

Использовали следующие параметры обучения: скорость обучения в процессе предобучения 0.2 для REBA и 0.05 для классического RBM для всех слоев, за исключением среднего слоя. Скорость обучения для среднего слоя бралась равной 0.001. Сравнительный анализ обоих методов представлен в таблице 1, где MSE training обозначает среднеквадратичную ошибку, полученную на обучающей выборке, а MSE test – на выборке тестирования.

Таблица 1. Сравнительный анализ

Метод	MSE training	MSE test
RBM	3.7801	4.0115
REBA	3.6490	3.8726

На рисунке 4 изображена динамика изменения среднеквадратичной ошибки в зависимости от номера эпохи для первого слоя глубокого автоэнкодера.

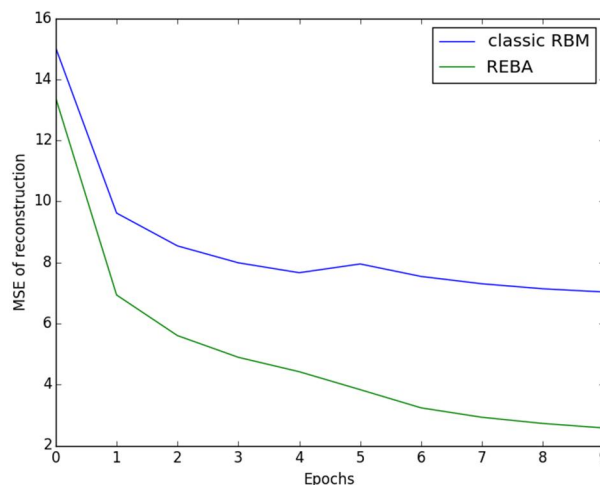


Рис. 4. Динамика изменения MSE на первом слое RBM и REBA

Как следует из рисунка 4 и таблицы 1, метод REBA является более эффективным по

сравнению с традиционным подходом.

Визуализация выборки MNIST, выполненная на основе REBA, представлена на рис.5 для первых 500 тестовых изображений каждого класса.

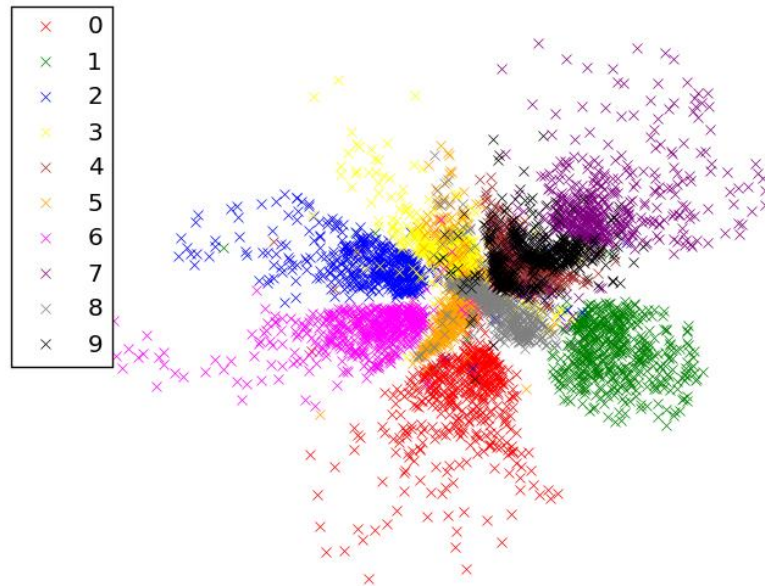


Рис. 5. Визуализация рукописных цифр

Заключение. В данной статье представлен новый метод для обучения RBM и соответственно нейронной сети глубокого доверия. По сравнению с классическим методом, который основывается на максимизации логарифма вероятности распределения входных данных, предложенный подход основывается на минимизации среднеквадратичной ошибки восстановления информации и позволяет учитывать нелинейную природу нейронных элементов. Эффективность предложенного метода показана на примере визуализации рукописных цифр.

1. Hinton, G. E., Osindero, S., Teh, Y. A fast learning algorithm for deep belief nets. *Neural Computation*, 18, 1527-1554 (2006)
2. Hinton, G. Training products of experts by minimizing contrastive divergence. *Neural Computation*, 14, 1771-1800 (2002)
3. Hinton, G., Salakhutdinov, R. Reducing the dimensionality of data with neural networks. *Science*, 313 (5786), 504-507 (2006)
4. Hinton, G. E. A practical guide to training restricted Boltzmann machines. (Tech. Rep. 2010-000). Toronto: Machine Learning Group, University of Toronto (2010)
5. Bengio, Y. Learning deep architectures for AI. *Foundations and Trends in Machine Learning*, 2(1), 1-127 (2009)
6. Bengio, Y., Lamblin, P., Popovici, D., Larochelle, H. Greedy layer-wise training of deep networks. In B. Scholkopf, J. C. Platt, T. Hoffman (Eds.), *Advances in neural information processing systems*, 11, pp. 153-160. MA: MIT Press, Cambridge (2007)
7. Erhan, D., Bengio, Y., Courville, A., Manzagol, P.-A., Vincent, P., Bengio, S. Why does unsupervised pre-training help deep learning? *Journal of Machine Learning Research*, 11:625-660 (2010)
8. Golovko, V. A Learning Technique for Deep Belief Neural Networks / V. Golovko, A. Kroshchanka, U. Rubanau, S. Jankowski // in book *Neural Networks and Artificial Intelligence*. – Springer, 2014. – Vol. 440. *Communication in Computer and Information Science*. – P. 136-146.
9. Головкин, В.А. От многослойных перцептронов к нейронным сетям глубокого доверия: парадигмы обучения и применение/ В.А.Головкин //XVII Всероссийская научно-техническая конференция «Нейроинформатика-2015»: Лекции по Нейроинформатике. – М.: НИЯУ МИФИ, 2015. – С. 47-84.
10. Головкин В.А. Нейронные сети: обучение, организация и применение. Кн. 4: Учеб. пособие для вузов / Общая ред. А.И. Галушкина. М.:ИПРЖР, 2001. – 256 с.