

Для Республики Беларусь одна из актуальных проблем, которая особенно обострилась после Чернобыльской катастрофы, – это техногенное и антропогенное загрязнение почв.

Большое значение при оценке и прогнозировании загрязнения окружающей среды в настоящее время имеют методы математического моделирования и реализующие их специализированные программные средства, которые позволяют производить оценку той или иной ситуации, связанной с обозначенной проблемой, при минимальных затратах времени и материальных средств, без непосредственного вмешательства в природные процессы. Компьютер способен успешно решать множество различных задач. Однако он бессилён в ситуациях, когда сам пользователь не до конца понимает механизмы происходящих процессов. Здесь может помочь искусственная нейронная сеть. Искусственные нейронные сети, созданные по аналогии с человеческим мозгом, способны обучаться и анализировать большие и сложные наборы данных, которые трудно обработать и использовать в рамках других методов моделирования.

УДК 004.8.032.26:631.472.6

РЕАЛИЗАЦИЯ АЛГОРИТМА ОБРАТНОГО РАСПРОСТРАНЕНИЯ ОШИБКИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО СИГНАЛА

д-р техн. наук, проф. С.П. КУНДАС, В.И. КОВАЛЕНКО, О.С. ХИЛЬКО

(Международный государственный экологический университет им. А.Д. Сахарова, Минск)

Предложен оригинальный способ обучения искусственных нейронных сетей, базирующийся на модификации алгоритма обратного распространения ошибки с использованием дополнительного сигнала. Данный метод позволяет добиться 100 %-ной сходимости в задачах прогнозирования миграции химических веществ в почве. Результаты практического применения нейронных сетей, обучаемых с применением описанного алгоритма, при решении таких задач показывают, что проблемы сходимости связаны прежде всего с недостаточностью функциональных возможностей их структуры для покрытия области решения целевой функции. Делая минимальные добавления в структуру и проводя тот же самый анализ в результате можно найти оптимальную структуру нейронной сети.

Введение. В настоящее время для обучения нейронных сетей (ИНС) существует целая серия алгоритмов [1 – 5]. Однако при использовании ИНС в прикладной области, в частности для прогнозирования миграции химических веществ в почве, обоснованным является применение алгоритма обучения, базирующегося на обучении «с учителем». Авторами данной статьи и работ [6 – 8] разработана система, в состав которой в качестве одного из инструментов решения входит ИНС. Обучение ИНС основано на модификации данного алгоритма. В режиме эксплуатации системы при поступлении новых обучающих данных, полученных в результате мониторинга почв, возможно их использование для корректировки прогнозов, получаемых при помощи ИНС. При этом возникает необходимость переобучения сети (при значительных погрешностях полученных результатов после вычислений на новых данных). В подобной ситуации обеспечение 100 %-ной сходимости обучения ИНС позволит сократить время у пользователя системы на организацию этого процесса. Проблема сходимости обучения ИНС в прикладной области связана в первую очередь с обучаемой выборкой, представляющей собой экспериментальные данные, источниками которых служат данные полевых измерений. При этом главной их особенностью является наличие методической, инструментальной и операторной погрешностей (погрешности съема данных) и неоднородность условий их съема [6 – 8]. В результате полученные данные являются несистематизированными, а в ряде случаев наблюдается их корреляция друг с другом. Так, среди алгоритмов обучения «с учителем» наиболее универсальным и жизнеспособным является алгоритм обратного распространения ошибки и его отдельные модификации. Этот алгоритм на сегодняшний день является одним из самых эффективных, поэтому его использование является целесообразным при условии минимизации недостатков, в первую очередь связанных со сходимостью обучения [2 – 5].

Модификация алгоритма обучения с использованием дополнительного сигнала. Для решения обозначенных проблем в настоящей работе предложен новый метод повышения сходимости обучения ИНС. Он заключается в формировании дополнительного сигнала на все веса отдельного слоя, начиная с последнего, как показано в выражении (1):

$$w_k(n+1) = w_k(n) + \Delta w_k + \xi, \quad (1)$$

где ξ – дополнительный сигнал, зависящий от повторяемости величины ошибки слоя.

При этом его величина не случайная и не постоянная. Она определяется только в тех случаях, если суммарная ошибка сети достаточно велика и незначительно изменяется в пределах нескольких итераций обучения. Во всех остальных случаях с целью увеличения скорости обучения величина ξ не определяется и приравнивается к нулю. Такая мера приводит к выходу отдельного слоя из состояния локального и глобального минимумов. Величина сигнала после генерации сохраняется в течение нескольких итераций. При этом слой успевает реабилитироваться и войти с большой вероятностью в состояние глобального минимума.

Работа алгоритма с использованием дополнительного сигнала представлена на рисунке 1. В известных алгоритмах [2 – 5] при обучении сети и ее входе в зону локального минимума, в случаях если зона локального минимума находится относительно «близко» к зоне глобального минимума целевой функции, значение адаптивного шага приближается к 1, а значение среднеквадратической ошибки является очень малым. При проведении корректировок, вызванных дополнительными средствами с целью вывода состояний ИНС из подобной ловушки, увеличивают именно приращение Δw_k на некоторое значение λ , зависящее от скорости сходимости или разницы величин ошибок. При этом не учитывается тот факт, что значения величины самого приращения и адаптивного шага очень малы. В результате чего эта

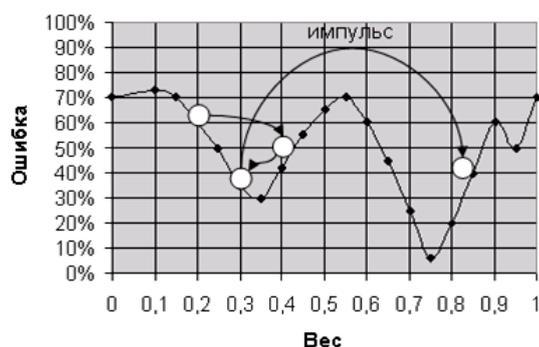


Рис. 1. Зависимость ошибки целевой функции от значения весов связей нейронов

мера чаще всего приводит к продолжению нахождения в окрестностях зоны локального минимума, но в более широких пределах, так как после ее применения скорость сходимости и разница между значениями ошибок возрастают, вследствие чего значение λ уменьшится, а ее предыдущей величины будет недостаточно, чтобы увеличить Δw_k на несколько порядков. Те же меры, но в которых отсутствует зависимость от скорости сходимости или разницы величин ошибок, не дадут стабилизироваться ИНС и в зоне глобального минимума, а новое значение λ увеличит постоянную составляющую скорости обучения [3, 4].

Ранее для повышения сходимости ИНС «с учителем» авторами работ [2 – 5] не применялся предложенный выше подход, иллюстрируемый формулой (1),

т.е. состояние ИНС на каждом шаге итерации изменялось незначительно. Это обуславливалось особенностями алгоритмов обучения, базирующихся на обратном распространении ошибки, в которых чрезмерное изменение состояний ИНС приводит к несбалансированности ее сходимости. В предлагаемом решении получаемая несбалансированность является временной мерой, обеспечивающей выход ИНС из локального минимума.

Следует отметить, что при решении задач предметной области наиболее часто используются ИНС многослойной структуры, где ошибка распространяется от последнего слоя к первому, при этом ее значение сильно уменьшается по мере приближения к первому слою в результате ее учета на предыдущих слоях. Не рекомендуется использовать в классах ИНС «с учителем» большое число слоев [4]. В этом случае выбранные начальные состояния весов первых слоев могут привести к поиску решений по минимизации ошибки в зоне локального минимума целевой функции первых слоев. Для недопущения подобной ситуации необходимы значительные изменения самих значений весов первых слоев, а разовые изменения получившихся в этом случае приращений (с учетом распространения ошибки) не приведут к желаемому эффекту.

В предложенной модификации алгоритма обратного распространения ошибки дополнительный сигнал ξ подается отдельно и максимально влияет на выходное значение веса нейрона, производя для слоя общий эффект и позволяя выйти из любого локального минимума. Адаптивная составляющая позволяет избежать попадания в новую зону локального минимума в районах, отдаленных от глобального минимума. При попадании в ситуацию, показанную на рисунке 2, алгоритм, перегруппировав сеть, в большинстве случаев позволит ее избежать.

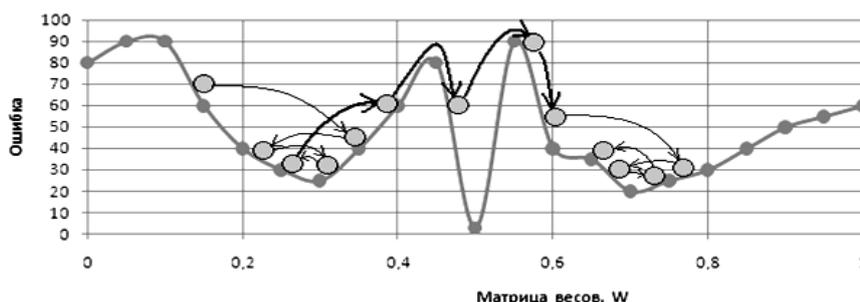


Рис. 2. Зависимость ошибки слоя от состояний весов связей нейронов на этом слое

На рисунке показана зависимость ошибки слоя от состояний весов связей нейронов на примере одного нейрона. Утолщенными стрелками условно показаны изменения значений весов связей нейронов во время обучения ИНС, когда предложенный алгоритм начал работать. Особенность этого варианта – нахождение глобального минимума целевой функции на достаточно близком относительном расстоянии между двумя локальными минимумами. При этом величины адаптивного шага недостаточно, чтобы преодолеть барьер между локальным минимумом и глобальным. А шаг весов нейронов текущего слоя с использованием дополнительного сигнала, компенсирующийся на второй итерации противодействующим адаптивным шагом, приводит к переходу значений весов в зону другого локального минимума.

При возникновении описанной ситуации производится генерация сигнала для предыдущего слоя, в результате чего происходит формирование новой зависимости ошибки текущего слоя и значений весов на нем. Для предыдущего слоя эта ситуация может быть уже разрешенной, т.е. глобальный минимум целевой функции не был пропущен.

Предложенный алгоритм схематично отображен на рисунке 3 [6, 7]. Входной и выходной слою показаны в виде двух подслоев. Входной слой представлен в виде слоя, распараллеливающего входной вектор сигналов на нейроны первого скрытого слоя. Выходной слой представляет собой последний слой нейронов и функционал для вычисления ошибки. Блок «Анализатор» выполняет функции анализа результатов прямого прохода в режиме обучения, при повторяемости результатов и значительной их погрешности он генерирует дополнительный сигнал на выходной слой. Если эта мера не приводит к сходимости обучения, то осуществляется генерация сигнала на следующий от выходного слой.

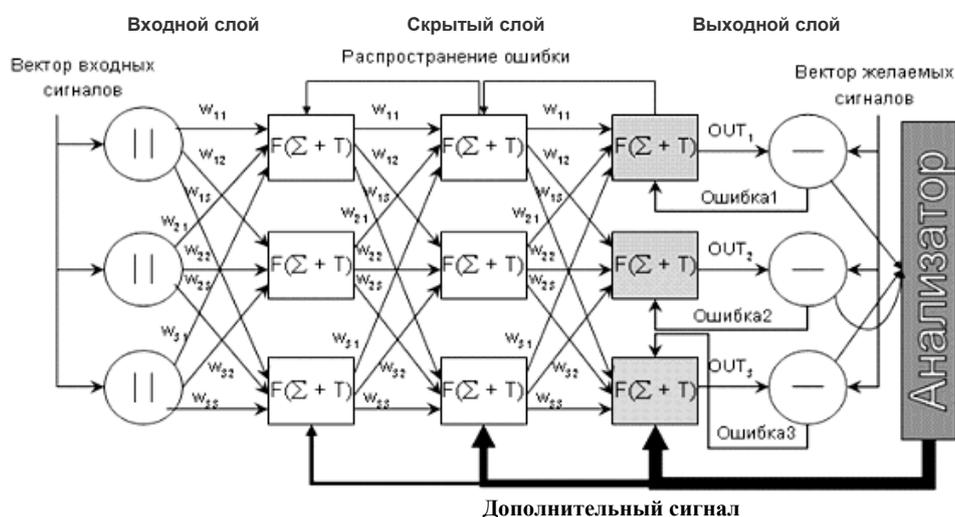


Рис. 3. Схема обучения ИНС с использованием дополнительного сигнала

Алгоритм работы анализатора разделен на две стадии, на первой из которых осуществляется анализ ситуации попадания в зону локального минимума, а на второй формируется величина сигнала и выполняется распространение сигнала на определенный слой ИНС.

Для дальнейшего описания алгоритма необходимо ввести понятие чувствительности ИНС к входным образам (набору входных сигналов). Чувствительность определяется степенью реакции подстройки состояний ИНС для заданного множества входных образов с целью минимизации целевой функции, т.е. максимальной скоростью сходимости ИНС для первых нескольких итераций обучения. Ввод этого понятия связан с разной характеристикой зависимости скорости сходимости ИНС от начальных состояний нейронов и общей структуры ИНС. Для крупных ИНС чувствительность их к входным образам будет существенно ниже, чем для небольших. Этот факт подтверждают различные примеры обучений ИНС [2 – 4].

Реализация алгоритма с использованием дополнительного сигнала. С учетом вышеизложенного определим выражения, описывающие подаваемый сигнал:

$$\xi = 2 \cdot (-1)^p \cdot |\eta_l \cdot \delta_j \cdot y_k|; \quad (2)$$

$$p = \begin{cases} 1: \delta_j(l) < 0, \\ 2: \delta_j(l) \geq 0, \end{cases} \quad (3)$$

где l – номер итерации, на которой скорость сходимости стала меньше установленной; $\delta_j(l)$ – ошибка слоя j на итерации l ; η_l – скорость слоя для итерации l .

Пусть n – чувствительность ИНС, E_C – величина текущей среднеквадратической ошибки, E_0 – величина среднеквадратической ошибки предыдущей итерации, E_R – величина желаемой среднеквадрати-

ческой ошибки, v – скорость обучения, q – число ситуаций пониженной сходимости, i – число сигналов, подаваемых последовательно на каждой итерации, i_p – число последовательностей подачи сигнала для одного слоя, c – номер слоя, на котором проводится последовательность подачи сигнала. Тогда алгоритм анализа попадания ИНС в зону локального минимума для целевой функции будет следующим:

- 1) если $i > 0$, осуществляется переход к алгоритму формирования сигнала, а затем выход из анализа на следующую итерацию обучения;
 - 2) определяется чувствительность ИНС n ;
 - 3) определяется и сохраняется величина текущей среднеквадратической ошибки E_C ;
 - 4) сравнивается E_C с E_R . Если $E_C < E_R$, осуществляется выход из алгоритма анализа;
 - 5) производится вычисление текущей скорости обучения $v_c = E_0 - E_C$;
 - 6) производится сравнение v_c и допустимой скоростью v_n , определяемой из выражения (4).
- Если $v_c \geq v_n$, то осуществляется переход на шаг 7, если $v_c < v_n$, то на шаг 8:

$$v_n = k \cdot n / 100, \quad (4)$$

где k – коэффициент допустимой чувствительности ИНС (в %). Желательно выбирать k от 0,01 до 1 %, в зависимости от скорости обучения и размерности структуры ИНС;

- 7) устанавливается $q = 0$ и производится выход из анализа на следующую итерацию;
- 8) если $q = 0$, то фиксируются значения для выражения (3);
- 9) устанавливается $q = q + 1$;
- 10) сравнивается значение q с допустимым q_n (выбирается от 10 до 20 итераций). При $q \geq q_n$ – переход на шаг 11, при $q < q_n$ – выход на следующую итерацию обучения;
- 11) если $i_p \leq 0$, то осуществляется переход на шаг 12, если $i_p > 0$ – то на шаг 13;
- 12) $i_p = 3$;
- 13) производится переход к алгоритму формирования и распространения сигналов;
- 14) окончание алгоритма.

Алгоритм формирования и распространения сигналов можно представить в виде следующих шагов:

- 1) устанавливается $q = 0$;
- 2) если $i_p \geq 3$, то осуществляется переход на шаг 3, иначе переходим на шаг 6;
- 3) увеличивается $c = c + 1$; $i_p = 0$;
- 4) если c больше числа слоев в ИНС, то происходит выход из алгоритма обучения (для случая с неудачным завершением);
- 5) устанавливается $i_p = 3$;
- 6) рассчитывается значение сигнала (выражение (2)) исходя из сохраненной информации по номеру итерации, спровоцировавшей работу алгоритма, знаку и скорости обучения. Остальные значения подставляются с учетом текущего слоя;
- 7) вычисленное ξ подставляется в выражение (1) для всех нейронов слоя c ;
- 8) $i_p = i_p - 1$.

Таким образом, разработанный алгоритм обучения ИНС с использованием дополнительного сигнала состоит из следующей последовательности действий:

- 1) последовательно подаются таблицы входных данных;
- 2) проводится процедура обучения ИНС с учетом выражения (1);
- 3) повтор шагов 1...2 m раз ($m = \{2; 10\}$) во избежание резкого скачка чувствительности;
- 4) выполняется анализ результатов с использованием предложенного в работе алгоритма;
- 5) повторяются шаги 4 и 5, пока суммарная среднеквадратическая ошибка не станет меньше заданной или анализ результатов не остановит обучение.

Если происходит остановка обучения из блока «Анализатор», т.е. возникает ситуация, описанная на рисунке 2 (но в рамках первого слоя), то функциональных возможностей ИНС недостаточно для обеспечения покрытия ею целевой функции, причиной чего может быть несоблюдение рекомендаций по формированию структуры ИНС.

Результаты обучения нейронной сети на данных по миграции радионуклидов в почве. Для тестирования предложенной модификации алгоритма обучения ИНС были выбраны структуры, обучающий и верификационный наборы данных, описанные в работе [8]. Для одних и тех же входных и выходных слоев ИНС были предложены три внутренние структуры нейронной сети для выявления оптимальной топологии сети, обладающей высокой степенью сходимости. В первом случае была использована структура, включающая один скрытый слой с одним нейроном, один распределительный (входной) и выходной слои. Результаты обучения нейронной сети показаны на рисунке 4, а. Обучение ИНС не произошло вследствие недостаточности покрытия ИНС области решений (пики на графике являются результатом работы предложенного алгоритма). Наиболее высокие из них характерны для первого слоя. Однако ни одна генерация дополнительного сигнала не привела к выходу из зоны локального минимума, из-за чего работа алгоритма была завершена. На рисунке 4, б показано применение разработанного алгоритма для другой

структуры ИНС, где число нейронов в скрытом слое было увеличено до 8. При осуществлении только одной существенной модификации весов первого слоя уже была достигнута сходимость в обучении ИНС.

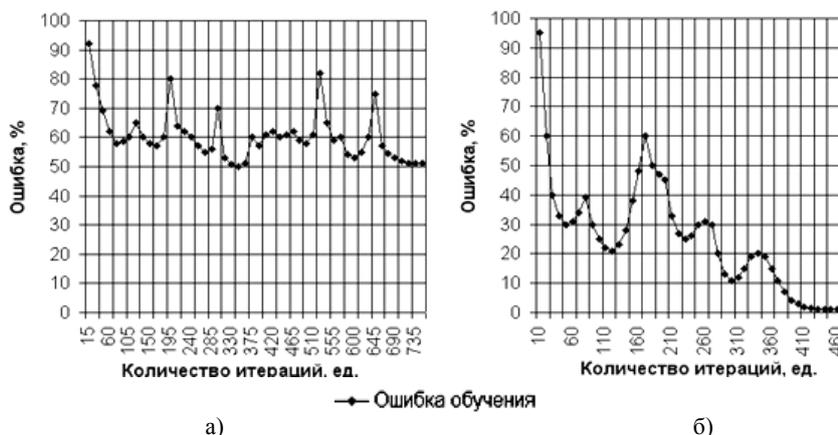


Рис. 4. Зависимость ошибки обучения ИНС от числа итераций:
а – необходимость обучения (недостаточность покрытия ИНС области решений);
б – сходимость обучения в условиях достаточного покрытия ИНС области решений



Рис. 5. Зависимость ошибки обучения при избыточном покрытии ИНС области решений

Третий пример, представленный на рисунке 5, показывает быструю сходимость обучения ИНС, так как был добавлен еще один скрытый слой с двумя нейронами, а генерация дополнительного сигнала осуществлялась только для последнего слоя. Обучение произошло быстрее, чем в предыдущих примерах.

Заключение. Предложенный алгоритм является новой и весьма простой модификацией алгоритма обратного распространения ошибки, позволяет добиться при соблюдении рекомендаций по построению структур ИНС 100 %-ной сходимости их обучения и в сравнении с известными разработками в этой области [2 – 5] более высокой скорости работы. Результаты практического применения ИНС, обучаемых с применением описанного алгоритма, при решении задач миграции химических веществ в почвах показывают, что

проблемы сходимости связаны прежде всего с недостаточностью функциональных возможностей структуры ИНС для покрытия области решения целевой функции. Делая минимальные добавления в структуру и проводя тот же самый анализ, можно найти в результате оптимальную структуру нейронной сети.

ЛИТЕРАТУРА

1. Kohonen, T. Self-Organizing Maps / T. Kohonen. – Berlin – Heidelberg. 1997.
2. Bishop, C.M. Theoretical foundation of neural networks / C.M. Bishop // Neural computing research group, 1996. Aston Univ. – P. 8.
3. Kanevski, M. Spatial Estimations and Simulations of environment data using geostatistics and artificial neural network / M. Kanevski, V. Demyanov, M. Maignan. – Pawlowsky-Glahn, 1997. – P. 533 – 538.
4. Головкин, В.А. Нейронные сети: обучение, организация и применение. Кн. 4: учеб. пособие для вузов / В.А. Головкин; ред. А.И. Галушкин. – М., 2001.
5. Rumelhart, D.E. Learning internal representations by error propagation / D.E. Rumelhart, G.E. Hinton, R.J. Williams // In Parallel distributed processing. – 1986. – № 1, Cambridge, MA: MIT Press. – P. 318 – 362.
6. Кундас, С.П. // Построение программных средств для прогнозирования миграции радионуклидов в почвах на базе гибридной экспертной системы // Вестн. Полоц. гос. ун-та. – 2008. – № 6. – С. 139–144.
7. Кундас, С.П. Применение экспертных систем для исследования и оптимизации процессов закалки / С.П. Кундас, В.И. Коваленко, Д.Г. Иванов // Вестн. Полоц. гос. ун-та. – 2005. – № 6. – С. 73 – 78.
8. Kundas, S. Application of computer modeling for analysis and forecasting of radionuclide's migration in soil / S. Kundas, V. Kovalenko, I. Gishkeluk // Journal of the University of Applied Sciences Mittweida (Germany). – 2006. – № 10. – P. 44 – 49.

Поступила 27.05.2009