СБОРНИК **НАУЧНЫХ ТРУДОВ НГТУ. – 2020. – № 4 (99).** – 50–58

УДК 004.85 DOI: 10.17212/2307-6879-2020-4-50-58

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРИМЕНИМОСТИ РОБАСТНЫХ ФУНКЦИЙ В НЕЙРОННЫХ СЕТЯХ*

М.А. СИВАК

630073, РФ, г. Новосибирск, пр. Карла Маркса, 20, Новосибирский государственный технический университет, аспирант кафедры теоретической и прикладной информатики. E-mail: pepelyaeva@ami.nstu.ru

Статья посвящена анализу возможности применения робастных функций в нейронных сетях. В работе рассматриваются различные робастные (устойчивые) функции с точки зрения их использования в качестве функции потерь в робастной модификации алгоритма обратного распространения ошибки. Данный алгоритм накладывает условие, что функция потерь должна быть непрерывно или бесконечно дифференцируема. Выполнен анализ 12 различных функций и их производных. Производная функции Charbonnier была получена автором. Сделаны выводы о том, какие из выбранных функций целесообразно использовать при проведении дальнейших исследований.

Ключевые слова: искусственная нейронная сеть, алгоритм обратного распространения ошибки, выбросы, робастный подход, функция потерь

ВВЕДЕНИЕ

Искусственные нейронные сети (ИНС) представляют собой мощный инструмент при решении задач анализа данных, однако зачастую точность их работы не слишком высокая [1–3]. Это связано в первую очередь с тем, что обычно анализируемые данные содержат в себе нетипичные наблюдения (или выбросы). Алгоритм обратного распространения ошибки, применяющийся для обучения ИНС, является неустойчивым к выбросам из-за использования в нем квадратичной функции потерь. Можно снизить влияние выбросов при обучении нейронной сети, если модифицировать данный алгоритм, используя робастный подход [4], который применяется как раз при работе с зашумленными данными. В рамках настоящей работы предполагается провести анализ нескольких робастных функций и определить, какие из них целесообразно использовать для построения устойчивого алгоритма обучения ИНС.

* Статья получена 13 октября 2020 г.

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Пусть имеется нейронная сеть, состоящая из N слоев и имеющая m выходов. Тогда y_j, $j=1,\ldots,m,$ – полученные значения на выходном слое нейронной сети; $w_{ik}^{(n-1)}$, $i=1,\ldots,\ l^{(n-1)}$, $k=1,\ldots,l^{(n)}$, – вес между k-м нейроном слоя n и i-м нейроном слоя $n-1$ ($l^{(n)}$ – количество нейронов на слое n).

При обучении нейронной сети требуется решить задачу оптимизации вида

$$E=\sum_{j=1}^{l^{(N)}} f(t_j,\,y_j)\to \min_{w_{ik}^{(1)},\ldots,w_{ik}^{(N-1)}},$$

где t_j – требуемый ответ на j-м выходе сети, а $f(t_j,\,y_j)$ – функция потерь на j-м выходе сети. Решение данной задачи требует вычисления производной суммарной функции потерь E, а следовательно, и производных отдельных функций $f(t_j,\,y_j)$ [5].

Как правило, в качестве функции потерь используют квадратичную функцию

$$f(t_j,\,y_j)=\frac{1}{2}(y_j-t_j)^2.$$

Однако, как уже было сказано выше, из-за использования данной функции алгоритм обучения нейронной сети является неустойчивым к выбросам. Вследствие этого была поставлена следующая задача: получить робастную модификацию алгоритма обратного распространения ошибки путем замены квадратичной функции потерь на устойчивую.

2. АНАЛИЗ РОБАСТНЫХ ФУНКЦИЙ

Прежде чем получить робастную модификацию алгоритма обратного распространения ошибки, необходимо выполнить анализ робастных функций и определить, какие из них можно и имеет смысл использовать. В ходе выполнения работы были проанализированы источники [6–14] и выбраны функции потерь, использующиеся в различных задачах анализа данных (например, для обработки изображений или оценивания параметров регрессий). При выборе функций учитывалось то, что функция потерь в алгоритме обратного распространения ошибки должна быть непрерывно или бесконечно дифференцируемой. Так, например, функция Geman–Reynolds, представленная в [13], была исключена из рассмотрения по причине того, что ее первая производная не определена в нуле. Выбранные для анализа робастные функции приводятся в левом столбце таблицы, в правом столбце данной таблицы приводятся производные этих функций. Производная функции Charbonnier была получена автором, производные остальных функций были представлены в рассмотренных источниках.

Робастные функции потерь и их производные

Функция потерь	Производная функции потерь
1. Хьюбера	
$\begin{cases} \frac{1}{2}(y_j - t_j)^2, & \lvert y_j - t_j \rvert \le \beta \\ \beta\lvert y_j - t_j \rvert - \frac{1}{2}\beta^2, & \lvert y_j - t_j \rvert > \beta \end{cases}$	$\begin{cases} y_j - t_j, & \lvert y_j - t_j \rvert \le \beta \\ -\beta, & y_j - t_j < -\beta \\ \beta, & y_j - t_j > \beta \end{cases}$
2. Эндрюса	
$\begin{cases} \beta(1 - \cos\frac{(y_j - t_j)}{\beta}), & \lvert y_j - t_j \rvert < \pi\beta \\ 2\beta, & \lvert y_j - t_j \rvert \ge \pi\beta \end{cases}$	$\begin{cases} \sin\frac{(y_j - t_j)}{\beta}, & \lvert y_j - t_j \rvert < \pi\beta \\ 0, & \lvert y_j - t_j \rvert \ge \pi\beta \end{cases}$
3. Хампеля	
$\begin{cases} (y_j - t_j)^2, & 0 \le \lvert y_j - t_j \rvert \le \alpha \\ \alpha^2 + \alpha(\lvert y_j - t_j \rvert - \alpha), & \alpha < \lvert y_j - t_j \rvert \le \beta \\ \alpha^2 + 2\alpha(\beta - \alpha) - \\ \quad -\frac{\alpha(\gamma - \lvert y_j - t_j \rvert)^2}{\gamma - \beta} + & \beta < \lvert y_j - t_j \rvert \le \gamma \\ \quad +\alpha(\gamma - \beta), & \\ \alpha^2 + 2\alpha(\beta - \alpha) + \alpha(\gamma - \beta), & \gamma < \lvert y_j - t_j \rvert \end{cases}$	$\begin{cases} 2(y_j - t_j), & 0 \le \lvert y_j - t_j \rvert \\ sign(y_j - t_j)2\alpha, & \alpha < \lvert y_j - t_j \rvert \le \beta \\ \frac{2\alpha}{\gamma - \beta}(\gamma - \lvert y_j - t_j \rvert) * & \beta < \lvert y_j - t_j \rvert \le \gamma \\ \quad * sign(y_j - t_j), & \\ 0, & \gamma < \lvert y_j - t_j \rvert \end{cases}$
4. Тьюки	
$\begin{cases} (y_j - t_j)^2, & \lvert y_j - t_j \rvert \le \beta \\ \beta^2, & \lvert y_j - t_j \rvert > \beta \end{cases}$	$\begin{cases} 2(y_j - t_j), & \lvert y_j - t_j \rvert < \beta \\ 0, & \lvert y_j - t_j \rvert \ge \beta \end{cases}$

Окончание таблицы

5. Биквадратная Тьюки	
$\begin{cases} \dfrac{(y_j-t_j)^6}{6\beta^4}-\dfrac{(y_j-t_j)^4}{2\beta^2}+\dfrac{(y_j-t_j)^2}{2}, & \lvert y_j-t_j\rvert<\beta \\ \dfrac{\beta^2}{6}, & \lvert y_j-t_j\rvert\geq\beta \end{cases}$	$\begin{cases} \dfrac{(y_j-t_j)^5}{\beta^4}-\dfrac{2(y_j-t_j)^3}{\beta^2}+(y_j-t_j), & \lvert y_j-t_j\rvert<\beta \\ 0, & \lvert y_j-t_j\rvert\geq\beta \end{cases}$
6. Рамсея	
$\dfrac{1-(1+\beta\lvert y_j-t_j\rvert)\exp(-\beta\lvert y_j-t_j\rvert)}{\beta^2}$	$(y_j-t_j)\exp\{-\beta\lvert y_j-t_j\rvert\}$
7. Коши (Лоренца)	
$\ln\left(\dfrac{1}{2}\left(\dfrac{y_j-t_j}{\beta}\right)^2+1\right)$	$\dfrac{y_j-t_j}{\frac{1}{2}(y_j-t_j)^2+\beta^2}$
8. Geman–McCluer	
$\dfrac{(y_j-t_j)^2/\beta}{1+(y_j-t_j)^2/\beta}$	$\dfrac{2(y_j-t_j)}{\beta(1+(y_j-t_j)^2/\beta)^2}$
9. «Fair»	
$\beta^2\left(\dfrac{\lvert y_j-t_j\rvert}{\beta}-\ln\left(1+\dfrac{\lvert y_j-t_j\rvert}{\beta}\right)\right)$	$\dfrac{y_j-t_j}{(1+\lvert y_j-t_j\rvert/\beta)}$
10. Charbonnier	
$\sqrt{\left(\dfrac{y_j-t_j}{\beta}\right)^2+1}$	$\dfrac{1}{\beta^2}\dfrac{y_j-t_j}{\sqrt{(y_j-t_j)^2/\beta^2+1}}$
11. Welsch	
$1-\exp\left(-\dfrac{1}{2}\left(\dfrac{y_j-t_j}{\beta}\right)^2\right)$	$\dfrac{1}{\beta^2}(y_j-t_j)\exp\left(-\dfrac{1}{2}\left(\dfrac{y_j-t_j}{\beta}\right)^2\right)$
12. Мешалкина	
$\beta^{-1}\left(1-\exp\left(\dfrac{-\beta(y_j-t_j)^2}{2}\right)\right)$	$\exp\left(\dfrac{-\beta(y_j-t_j)^2}{2}\right)(y_j-t_j)$

Все рассмотренные функции можно разделить на две группы. В первую группу входят функции, параметры которых определяют не только поведение функций на интервалах области определения, но и граничные точки этих интервалов. Ко второй группе относятся функции, параметры которых определяют поведение данных функций на всей области определения.

Функции второй группы принадлежат классу бесконечно дифференцируемых функций. Производные этих функций стремятся к константе при модуле аргумента, стремящемся к бесконечности. Функции первой группы принадлежат к классу непрерывно-дифференцируемых функций. Их первая производная не является дифференцируемой во всех точках области определения и при модуле аргумента, стремящемся к бесконечности, равна константе. Такое поведение первых производных позволяет учитывать влияние выбросов при обучении нейронной сети пропорционально их удаленности от основной группы наблюдений.

Среди функций первой группы особое внимание следует уделить функции Хампеля, поскольку в ней используется не один параметр, а три, что потенциально может обеспечить более гибкую настройку алгоритма. Также можно заметить, что производные функций Тьюки и Хьюбера являются схожими по виду с той лишь разницей, что на полуинтервалах $(-\infty,-\beta]$ и $[\beta,+\infty)$ производная функции Тьюки приобретает нулевое значение. Поскольку от значения параметра β зависит только ширина обозначенных интервалов, но не само значение производной, использование этой функции представляется сомнительным, так как выбросы в данном случае будут попросту исключаться (либо рассматриваемая функция будет совпадать с квадратичной функцией). В то же время функция Эндрюса и биквадратная функция Тьюки, хотя их производные и приобретают нулевое значение на тех же самых полуинтервалах, представляют собой гораздо больший интерес, так как значение параметра влияет не только на ширину интервалов, но и на значение самой производной.

Что касается функций второй группы, среди них можно отдельно выделить функцию Charbonnier, поскольку ее производная единственная при стремлении аргумента к $\pm\infty$ стремится не к нулевому значению, а к значению $\pm\frac{1}{\beta}$. Такое поведение производной за счет изменения значения параметра β, вероятно, может позволить дополнительно контролировать влияние выбросов при обучении нейронной сети.

Использование рассмотренных робастных функций (за исключением функции Тьюки по обозначенной выше причине) вместо квадратичной функции потерь позволит получить класс совершенно новых нейронных сетей, свойства которых необходимо будет изучить в ходе дальнейших исследований. В работе [15] уже были получены первые результаты для модификации алгоритма обратного распространения ошибки с использованием функции Хьюбера, что показывает потенциальную возможность применения других робастных функций в нейронных сетях.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, в ходе настоящей работы были выбраны и проанализированы 12 робастных функций. Все они удовлетворяют условиям алгоритма обратного распространения ошибки (имеют производную первого порядка). Выбранные функции были разделены на две группы в зависимости от того, что определяют их параметры: поведение функции на всей области определения или поведение функции на интервалах области определения, а также граничные точки данных интервалов. В ходе анализа был сделан вывод о том, что одну из функций (Тьюки) целесообразно будет исключить из дальнейшего рассмотрения, тогда как остальные 11 функций могут быть использованы при модификации алгоритма обучения ИНС.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-37-90077.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Ланкин Ю.П., Басканова Т.Ф., Лобова Т.И.* Нейросетевой анализ сложноорганизованных экологических данных // Современные проблемы науки и образования. – 2012. – № 4. – URL: https://www.science-education.ru/ru/article/view?id=6754 (дата обращения: 12.03.2021).
2. *Манжула В.Г., Федяшов Д.С.* Нейронные сети Кохонена и нечеткие нейронные сети в интеллектуальном анализе данных // Фундаментальные исследования. – 2011. – № 4. – С. 108–115. – URL: https://www.fundamental-research.ru/ru/article/view?id=21239 (дата обращения: 12.03.2021).
3. *Perervenko V.* Глубокие нейросети. Ч. 1. Подготовка данных. – URL: https://www.mql5.com/ru/articles/3486 (дата обращения: 12.03.2021).
4. *Huber J.P.* Robust statistics. – 2nd ed. – Hoboken, NJ: Wiley, 2009. – 370 p. – DOI: 10.1002/9780470434697.
5. *Bishop C.* Neural networks for pattern recognition. – New York: Oxford University Press, 1995. – 502 p.

6. *Fan J., Gijbels I.* Local polynomial modelling and its applications. – London: Chapman & Hall, 1996. – 360 p. – DOI: 10.1201/9780203748725.

7. *Айвазян С.А., Енюков И.С., Мешалкин Л.Д.* Прикладная статистика: исследование зависимостей. – М.: Финансы и статистика, 1985. – 448 с.

8. *Вучков И., Бояджиева Л., Солаков Е.* Прикладной линейный регрессионный анализ. – М.: Финансы и статистика, 1987. – 240 с.

9. *Демиденко Е.З.* Линейная и нелинейная регрессии. – М.: Финансы и статистика, 1981. – 304 с.

10. *Дрейпер Н., Смит Г.* Прикладной регрессионный анализ. – 3-е изд. – М.: Вильямс, 2007. – 912 с.

11. *Black M.J., Anandan P.* The robust estimation of multiple motions: Parametric and piecewise-smooth flow fields // Computer Vision and Image Understanding. – 1996. – Vol. 63, N 1. – P. 75–104.

12. Two deterministic half-quadratic regularization algorithms for computed imaging / P. Charbonnier, L. Blanc-Feraud, G. Aubert, M. Barlaud // Proceedings 1994 IEEE International Conference on Image Processing. – Austin, TX, 1994. – Vol. 2. – P. 168–172.

13. *Black M.J., Rangarajan A.* On the unification of line processes, outlier rejection, and robust statistics with applications in early vision // International Journal of Computer Vision. – 1996. – Vol. 19 (1). – P. 57–91. – DOI: 10.1007/BF00131148.

14. *Banerjee R.* Fair M-Estimators as a cost function for FASTICA // International Conference on Signal Processing and Communication, ICSC 2013. – Noida, India, 2013. – P. 445–448. – DOI: 10.1109/ICSPCom.2013.6719831.

15. *Сивак М.А., Тимофеев В.С.* Оптимизация работы робастной нейронной сети для задачи классификации // Наука. Технологии. Инновации: в 9 ч., Новосибирск, 30 ноября – 4 декабря 2020. – Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2020. – Ч. 2. – С. 298–300.

Сивак Мария Алексеевна, младший научный сотрудник научно-исследовательской лаборатории планирования эксперимента и анализа многофакторных объектов им. Денисова В.И. Новосибирского государственного технического университета. Основное направление научных исследований – прикладная математическая статистика, машинное обучение, обработка текстов на естественном языке. E-mail: pepelyaeva@ami.nstu.ru

DOI: 10.17212/2307-6879-2020-4-50-58

The research on using robust functions for neural networks*

M.A. Sivak

Novosibirsk State Technical University, 20 Karl Marx Avenue, Novosibirsk, 630073, Russian Federation, post-graduate student of the department of theoretical and practical computer science. E-mail: pepelyaeva@ami.nstu.ru

The paper is devoted to analyzing the ability of using robust functions for building neural networks. The research highlights different robust functions in terms of applying them for obtaining a robust modification of the back-propagation algorithm. The algorithm requires that the used loss function should be infinitely or continuously differentiable. The analysis of twelve different functions has been done. The derivate of Charbonnier function has been obtained by the author. The results of analysis shows which functions can be used for the further investigation and which ones should be excluded from it.

Keywords: artificial neural network, back-propagation algorithm, outliers, robust approach, loss function

REFERENCES

1. Lankin Yu.P., Baskanova T.F., Lobova T.I. Neirosetevoi analiz slozhnoorganizovannykh ekologicheskikh dannykh [Neural network analysis of complicated ecological data]. *Sovremennye problemy nauki i obrazovaniya = Modern problems of science and education*, 2012, no. 4. Available at: https://www.science-education.ru/ru/article/view?id=6754 (accessed 12.03.2021).

2. Manzhula V.G., Fedyashov D.S. Neironnye seti Kokhonena i nechetkie neironnye seti v intellektual'nom analize dannykh [Kohonen neural networks and fuzzy neural networks in data mining]. *Fundamental'nye issledovaniya = Fundamental Research*, 2011, no. 4. pp. 108–115. Available at: https://www.fundamental-research.ru/ru/article/view?id=21239 (accessed 12.03.2021).

3. Perervenko V. *Glubokie neiroseti*. Ch. 1. *Podgotovka dannykh* [Deep neural networks. Pt. 1. Data preprocessing]. Available at: https://www.mql5.com/ru/articles/3486 (accessed 12.03.2021).

4. Huber J.P. *Robust statistics*. 2nd ed. Hoboken, NJ, Wiley, 2009. 370 p. DOI: 10.1002/9780470434697.

5. Bishop C. *Neural networks for pattern recognition*. New York, Oxford University Press, 1995. 502 p.

6. Fan J., Gijbels I. Local polynomial modelling and its applications. London, Chapman & Hall, 1996. 360 p. DOI: 10.1201/9780203748725.

* *Received 13 October 2020.*

7. Aivazyan S.A., Enyukov I.S., Meshalkin L.D. *Prikladnaya statistika: issledovanie zavisimostei* [Applied statistics: dependency investigation]. Moscow, Finansy i statistika Publ., 1985. 448 p.

8. Vuchkov I., Boyadzhieva L., Solakov E. *Prikladnoi lineinyi regressionnyi analiz* [Applied linear regression analyzis]. Moscow, Finansy i statistika Publ., 1987. 240 p.

9. Demidenko E.Z. *Lineinaya i nelineinaya regressii* [Linear and non-linear regressions]. Moscow, Finansy i statistika Publ., 1981. 304 p.

10. Draper N.R., Smith H. *Applied regression analysis*. 3rd ed. New York, Wiley, 1998 (Russ. ed.: Dreiper N., Smit G. *Prikladnoi regressionnyi analiz*. 3rd ed. Moscow, Williams Publ., 2007. 912 p.).

11. Black M.J., Anandan P. The robust estimation of multiple motions: Parametric and piecewise-smooth flow fields. *Computer Vision and Image Understanding*, 1996, vol. 63, no. 1, pp. 75–104.

12. Charbonnier P., Blanc-Feraud L. Aubert G., Barlaud M. Two deterministic half-quadratic regularization algorithms for computed imaging. *Proceedings 1994 IEEE International Conference on Image Processing*, Austin, TX, 1994, vol. 2, pp. 168–172.

13. Black M.J., Rangarajan A. On the unification of line processes, outlier rejection, and robust statistics with applications in early vision. *International Journal of Computer Vision*, 1996, vol. 19 (1), pp. 57–91. DOI: 10.1007/BF00131148.

14. Banerjee R. Fair M-Estimators as a cost function for FASTICA. *International Conference on Signal Processing and Communication, ICSC 2013*, Noida, India, 2013, pp. 445–448. DOI: 10.1109/ICSPCom.2013.6719831.

15. Sivak M.A., Timofeev V.S. [Optimizing robust neural network for the classification problem]. *Nauka. Tehnologii. Innovatsii*. V 9 ch. [Science. Technology. Innovation. In 9 pt.], Novosibirsk, 2020, pt. 2, pp. 298–300. (In Russian).

Для цитирования:

Сивак М.А. Исследование применимости робастных функций потерь в нейронных сетях // Сборник научных трудов НГТУ. – 2020. – № 4 (99). – С. 50–58. – DOI: 10.17212/2307-6879-2020-4-50-58.

For citation:

Sivak M.A. Issledovanie primenimosti robastnykh funktsii poter' v neironnykh setyakh [The research on using robust loss functions for neural networks]. *Sbornik nauchnykh trudov Novosibirskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta = Transaction of scientific papers of the Novosibirsk state technical university*, 2020, no. 4 (99), pp. 50–58. DOI: 10.17212/2307-6879-2020-4-50-58.