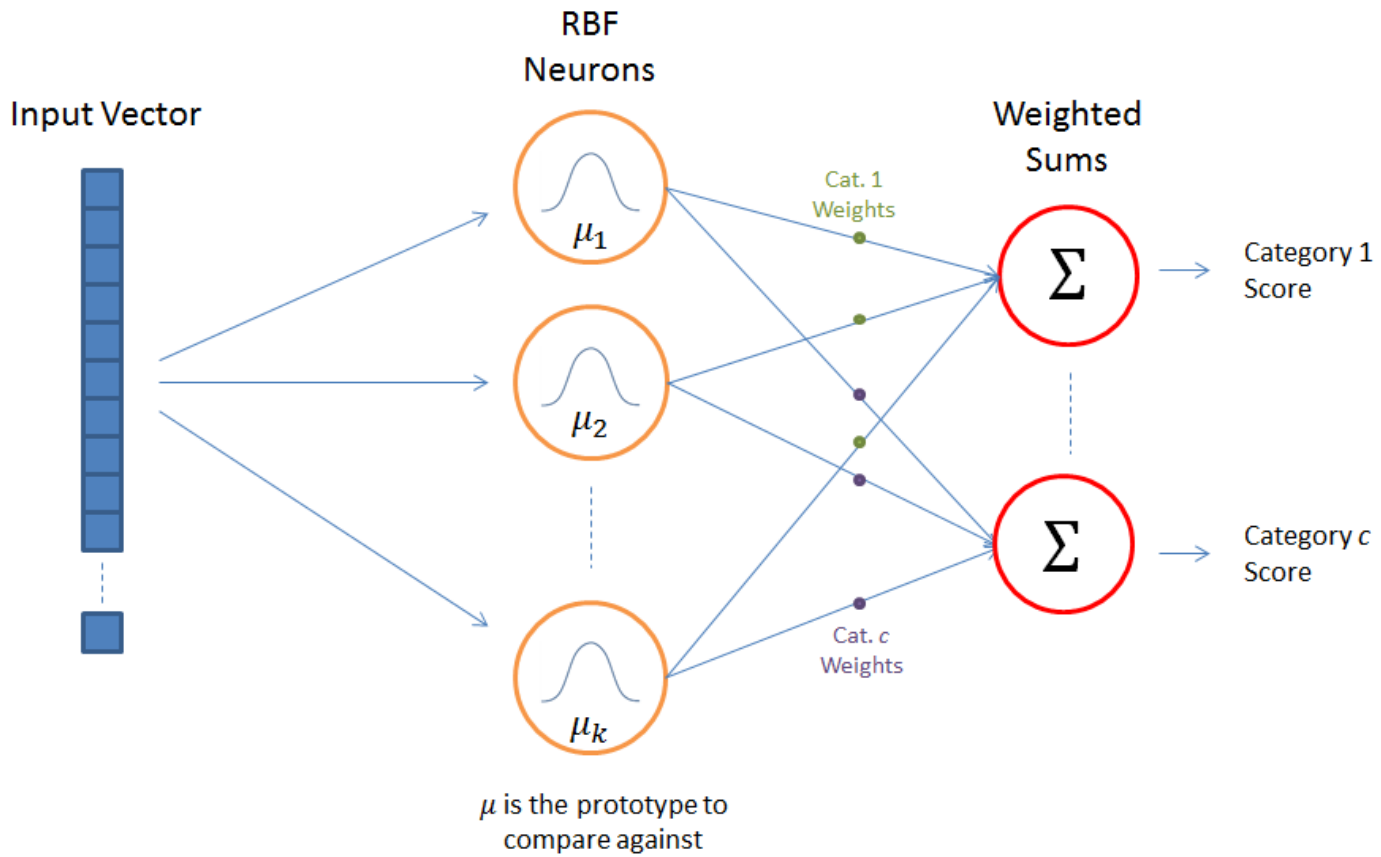
RBF Radial Basis Functions

Sieci neuronowe z radialnymi funkcjami bazowymi

Radial Basis Function Network



Rys: Chris McCormick, Radial Basis Function Network (RBFN) Tutorial

Sieć RBF

Funkcja realizowana przez sieć RBF z jednym wyjściem:

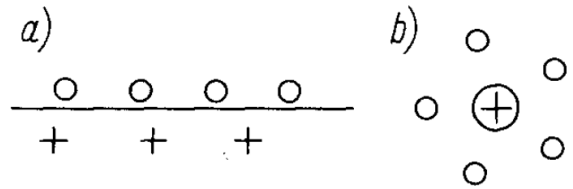
$$f(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{K} w_i \varphi(\|\mathbf{x} - \mathbf{c}_i\|) + w_0$$

gdzie K - liczba funkcji bazowych z centrami w $\mathbf{c}_i$

- jedna warstwa ukryta, neurony z radialnymi funkcjami
- wagi połączeń neuronów ukrytych definiują centrum $\mathbf{c}_i$ funkcji radialnej
- funkcja bazowa (radialna) φ określa podobieństwo przypadku $\mathbf{x}$ do centrum (prototypu) $\mathbf{c}_i$
- wyjścia liniowe - ważona suma pobudzeń neuronów radialnych

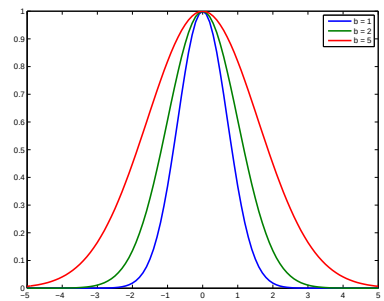
Funkcje radialne

- funkcje radialne mapują relacje lokalne, gdzie perceptrony (np. neurony sigmoidalne) mapują relacje globalne



- argumentem funkcji radialnej jest odległość od pewnego centrum (od prototypu) $\|\mathbf{x} - \mathbf{c}\|$. Zazwyczaj stosuje się metrykę euklidesową.
- najczęściej stosowane funkcje radialne $\varphi(x)$ posiadają maksimum w $x = 0$ i zanikają w obszarach dalekich od $x = 0$, np. funkcja Gaussa

$$\varphi(x) = e^{-\frac{x^2}{\sigma}}$$



- współczynnik dyspersji σ decyduje o zasięgu funkcji bazowej

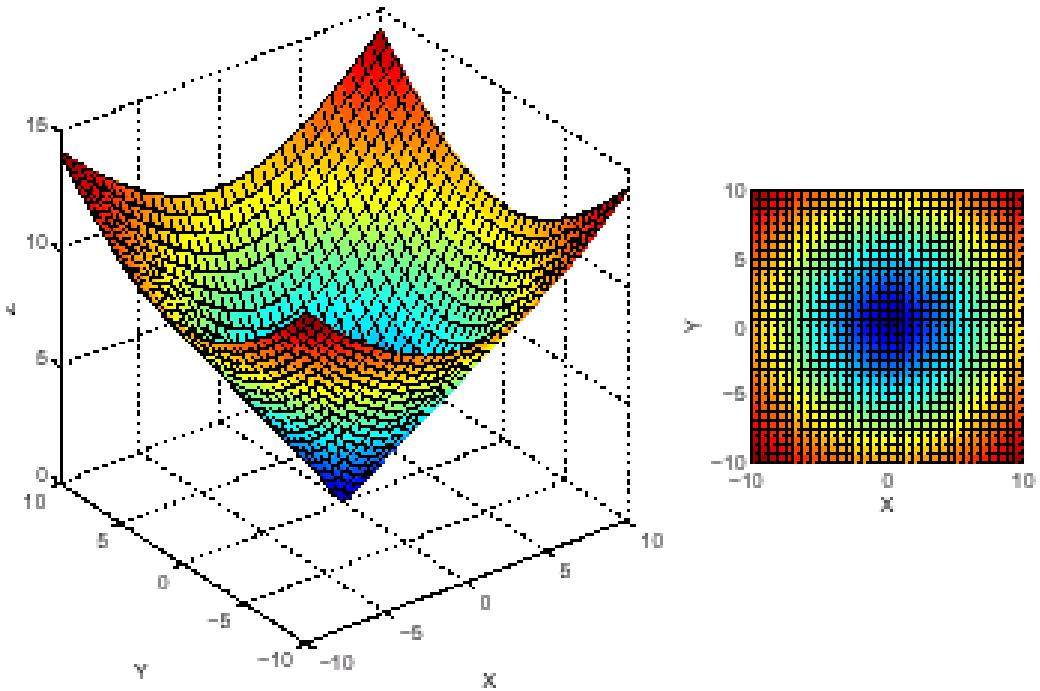
Przykłady funkcji radialnych

Niech $r = \|\mathbf{x} - \mathbf{c}_i\|$

$h(r) = r$		liniowa
$h(r) = e^{-(\frac{r}{\sigma})^2}$		gaussowska
$h(r) = (\sigma^2 + r^2)^\beta,$	$0 < \beta < 1$	*multiquadratic* (wielokwadratowa)
$h(r) = (\sigma^2 + r^2)^{-\alpha},$	$\alpha > 0$	*inverse multiquadratic*
$h(r) = (\sigma r^2) \ln(\sigma r)$		*thin-plate spline* (cienkiej płytki)
$h(r) = \sigma^2 + r^2$		wielomianowa

Funkcja liniowa współrzędnej radialnej

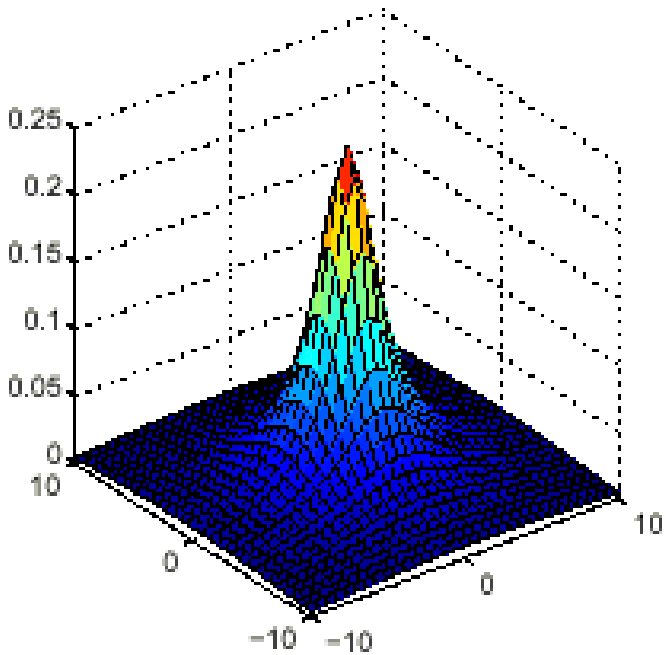
$$h_i(r) = r = \|\mathbf{x} - \mathbf{c}_i\|$$

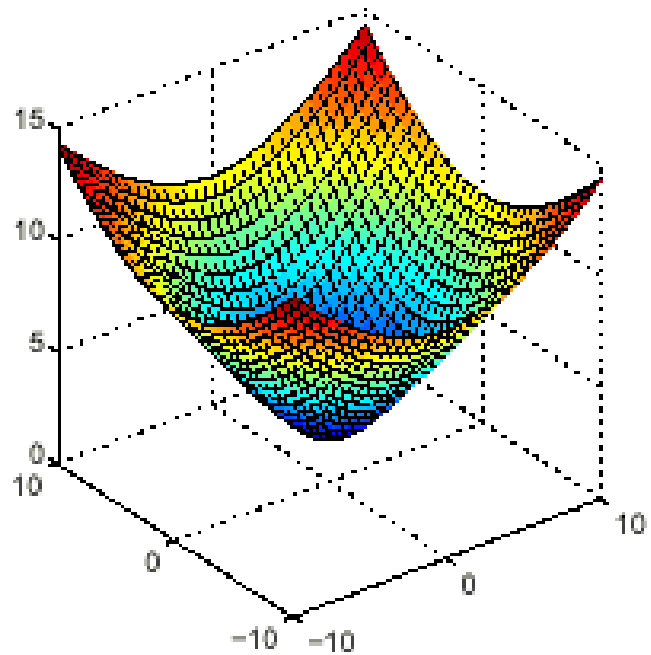


Funkcje wielokwadratowe

$$h(r) = (\sigma^2 + r^2)^{-\alpha}, \quad \alpha = 1$$

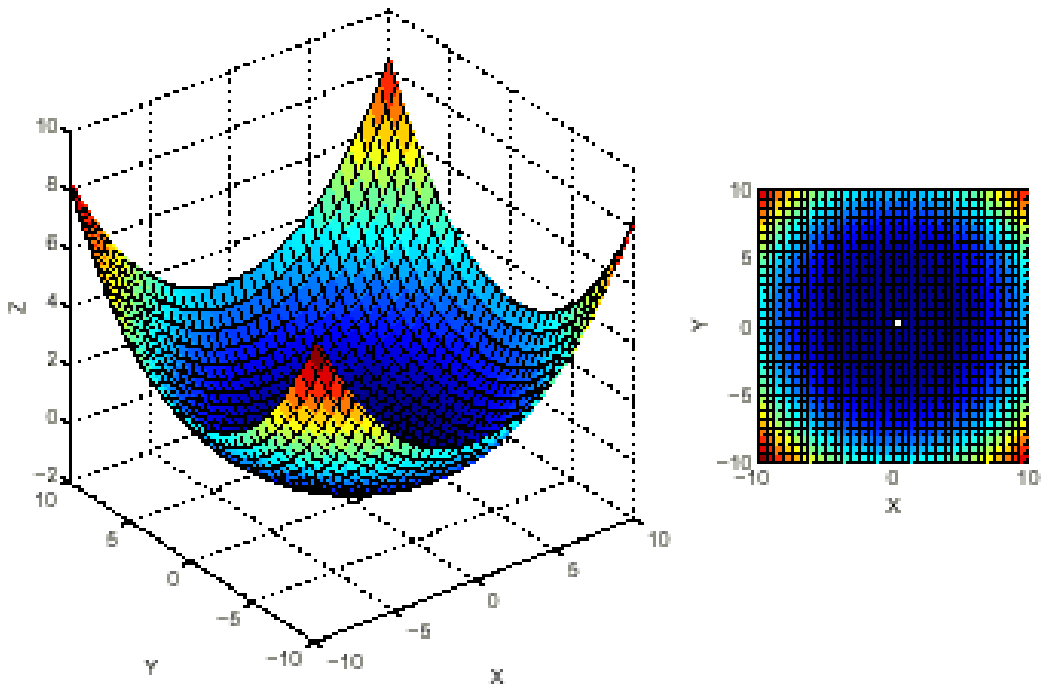
$$h(r) = (\sigma^2 + r^2)^{\beta}, \quad \beta = 0.5$$





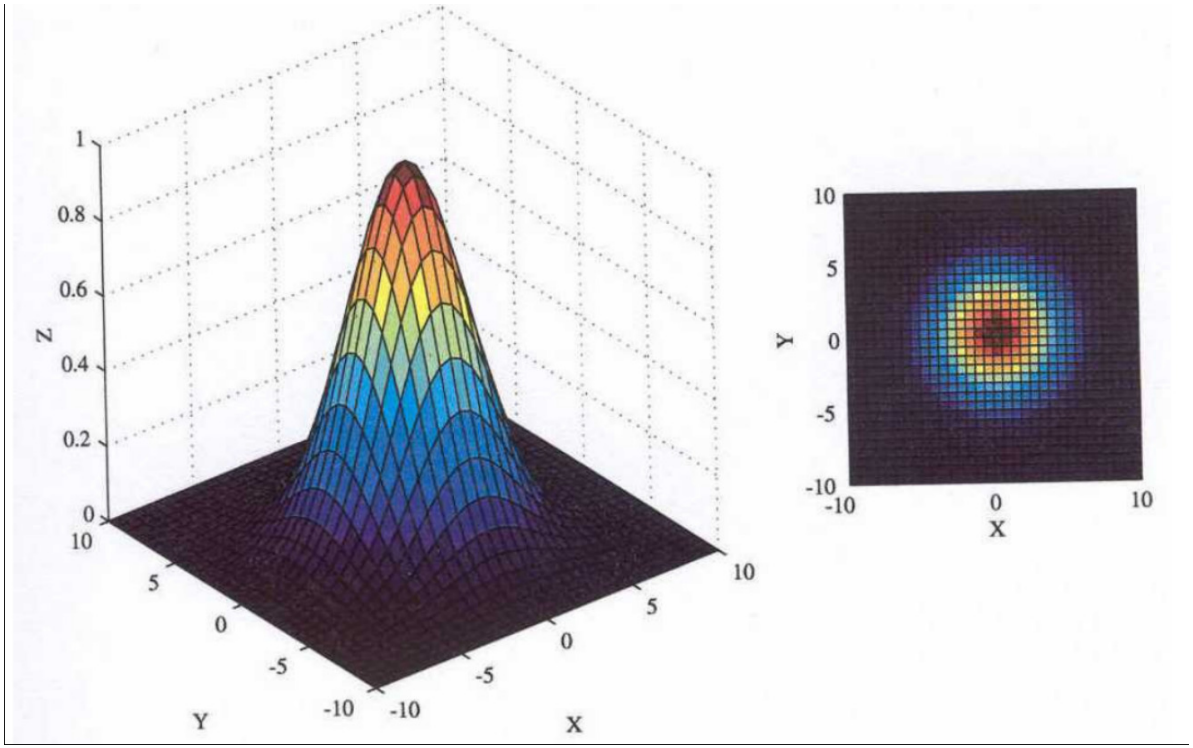
Funkcja cienkiej płytki

$$h(r) = (\sigma r^2) \ln(\sigma r)$$



Funkcja Gaussa

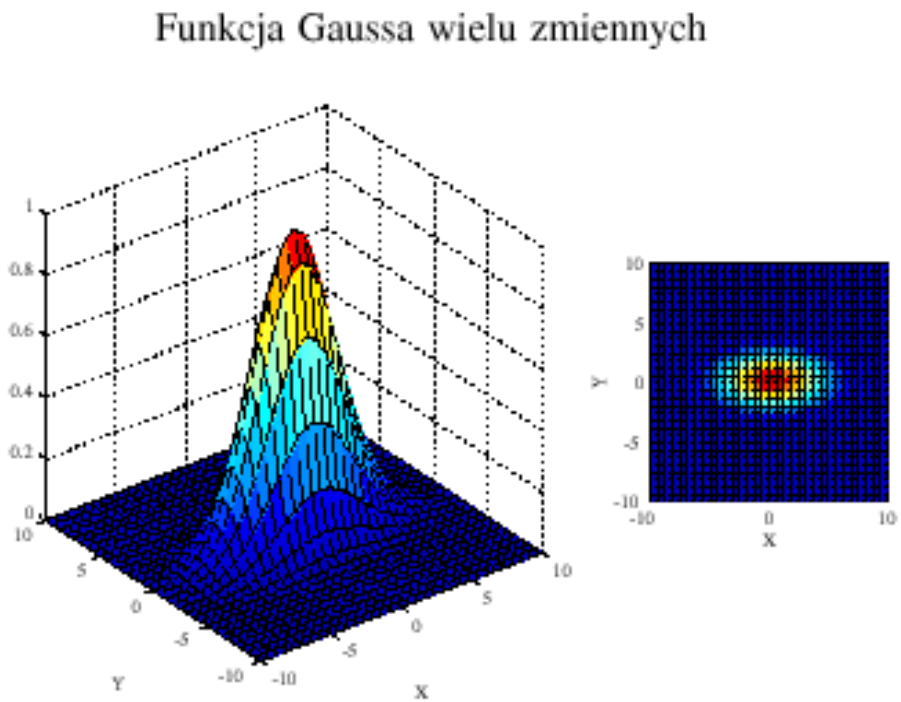
$$h(r) = e^{-\frac{r^2}{2\sigma^2}}$$



Najczęściej używana w roli funkcji bazowej RBF

Funkcja Gaussa z macierzą dyspersji

$$h(r) = e^{-\frac{r^2}{2\sigma^2}} = e^{-\frac{1}{2}(\mathbf{x}-\mathbf{c})^T \Sigma^{-1}(\mathbf{x}-\mathbf{c})}$$



Macierz $\mathbf{\Sigma}$ określa rozmycia i rotacje funkcji w wielowymiarowej przestrzeni

Uczenie RBF jako problem aproksymacji

Dla N punktów $\mathbf{x}_i, y_i$ znajdź funkcję spełniającą

$$f(\mathbf{x}_i) = y_i \quad i = 1, \ldots, N$$

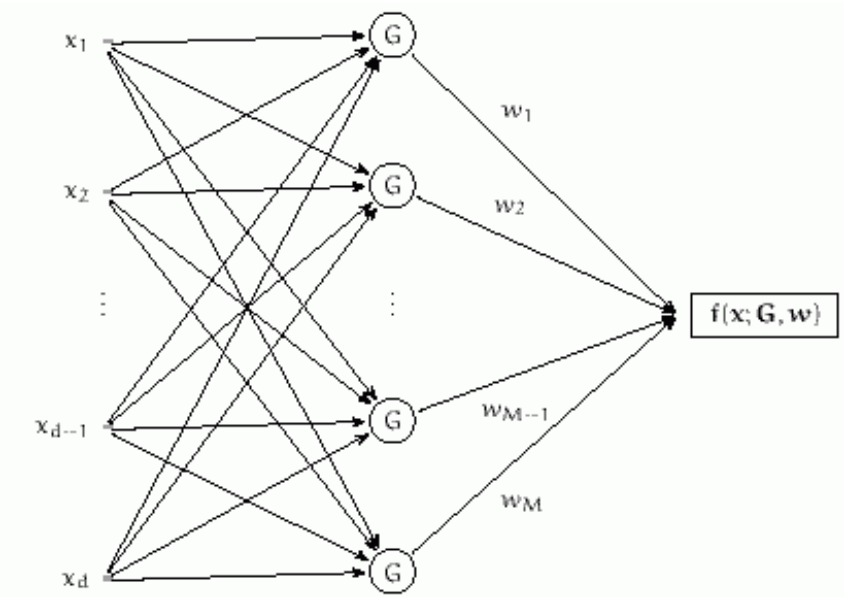
Funkcja sieci RBF

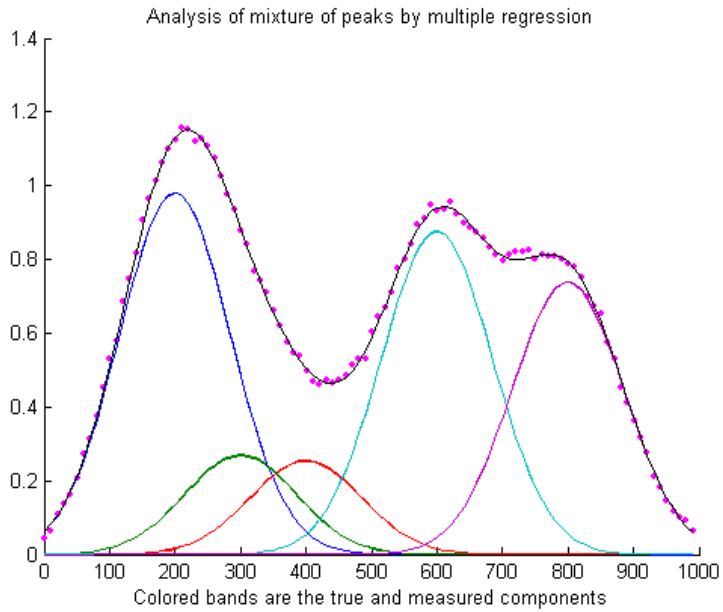
$$f(\mathbf{x}_i) = \sum_{j=1}^{K} w_j \varphi \left(\|\mathbf{x}_i - \mathbf{c}_j\| \right)$$

Szukamy minimum funkcji błędu MSE

$$E = \sum_{i=1}^{N} \left(y_i - f(\mathbf{x}_i) \right)^2$$

RBF z jedną warstwą ukrytą i linowym wyjściem jest uniwersalnym aproksymatorem





Rys: https://terpconnect.umd.edu/~toh/spectrum/CurveFittingB.html

Rozwiązanie RBF

Dla $K = N$ gdzie centra funkcji bazowych są ustalone w punktach treningowych $\mathbf{x_i} = \mathbf{c_i}$

$$\begin{pmatrix} h_{1,1} & h_{1,2} & \cdots & h_{1,N} \\ h_{2,1} & h_{2,2} & \cdots & h_{2,N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ h_{N,1} & h_{N,2} & \cdots & h_{N,N} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_N \end{pmatrix}$$

$$h_{ij} = \varphi(\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|)$$

$$\mathbf{Hw} = \mathbf{y}$$

dla $\mathbf{x}_1 \neq \mathbf{x}_2 \neq \ldots \neq \mathbf{x}_N$ macierz $\mathbf{H}$ jest nieosobliwa i dodatnio określona, więc istnieje

$$\mathbf{w} = \mathbf{H}^{-1}\mathbf{y}$$

RBF jako problem aproksymacji

- dla radialnych funkcji bazowych macierz interpolacji $\mathbf{H}$ dodatnio określona (Light 1992)
- dla wąskich funkcji Gaussa (gdy $\mathbf{H} \approx \mathbf{I}$) istnieje rozwiązanie trywialne $\mathbf{w} = \mathbf{y}$ o niskiej generalizacji
- problem źle określony, przewymiarowanie
- hiperpłaszczyzna interpolacji nie jest gładka
- większe dyspersje σ i mniejsza liczba funkcji ($K < N$) $\rightarrow$ lepsza generalizacja

Aproksymacja RBF

Dla ustalonych $\mathbf{c}_i$ oraz σ_i gdy $K < N$

$$\begin{pmatrix} h_{1,1} & h_{1,2} & \cdots & h_{1,K} \\ h_{2,1} & h_{2,2} & \cdots & h_{2,K} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ h_{N,1} & h_{N,2} & \cdots & h_{N,K} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_K \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_K \end{pmatrix}$$

$$h_{ij} = \varphi(\|\mathbf{x}_i - \mathbf{c}_j\|)$$

$$\mathbf{Hw} = \mathbf{y}$$

rozwiązanie układu równań przez pseudoinwersję

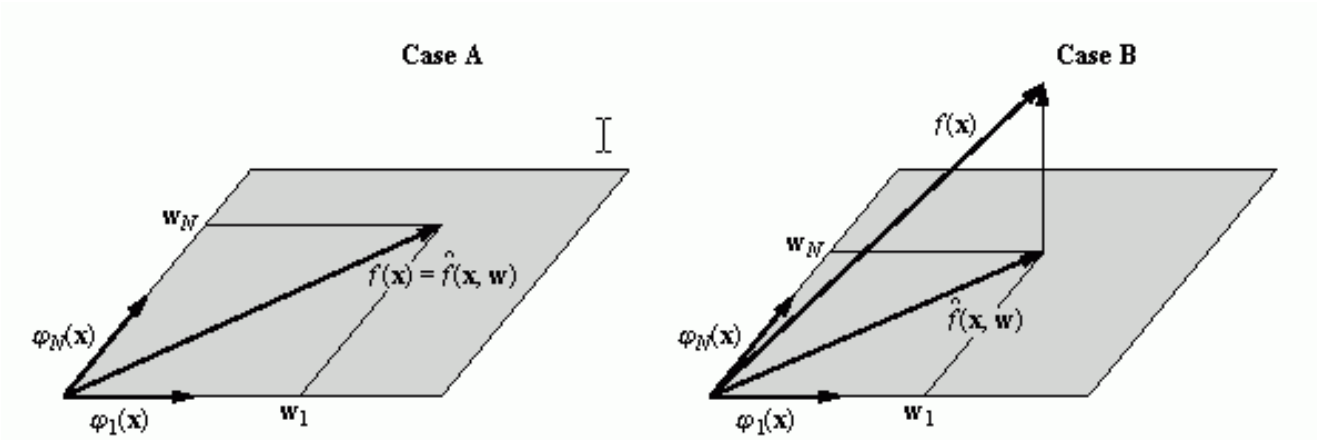
$$\mathbf{w} = \mathbf{H}^{+}\mathbf{y}, \qquad \text{gdzie} \qquad \mathbf{H}^{+} = (\mathbf{H}^{T}\mathbf{H})^{-1}\mathbf{H}^{T}$$

W praktyce pseudoinwersję realizuje się za pomocą dekompozycji SVD

Interpretacja geometryczna

Jeśli prawdziwa aproksymowana funkcja $f(x)$ leży w przestrzeni rozpiętej przez wektory bazowe $\Phi(\mathbf{x})$ to możliwe jest rozwiązanie bez błędu, w przeciwnym razie aproksymowana jest projekcja ortogonalna (błąd jest ortogonalny do p-ni bazowej).

$$\hat{f}(\mathbf{x};\mathbf{w}) = \sum_i w_i \varphi_i(\mathbf{x})$$



Separacja w wielowymiarowej przestrzeni

Twierdzenie (Cover 1965):
Jeśli przekształcić wzorce $\mathbb{X} = \{\mathbf{x}_i\}, i = 1, \ldots, N$, nieliniową funkcją na wektory $\Phi(\mathbf{x}_i) = [\varphi_1(\mathbf{x}_i), \varphi_2(\mathbf{x}_i), \ldots, \varphi_K(\mathbf{x}_i)]^T$ gdzie $K > N$ to rośnie prawdopodobieństwo liniowej separacji, tj. istnieje płaszczyzna

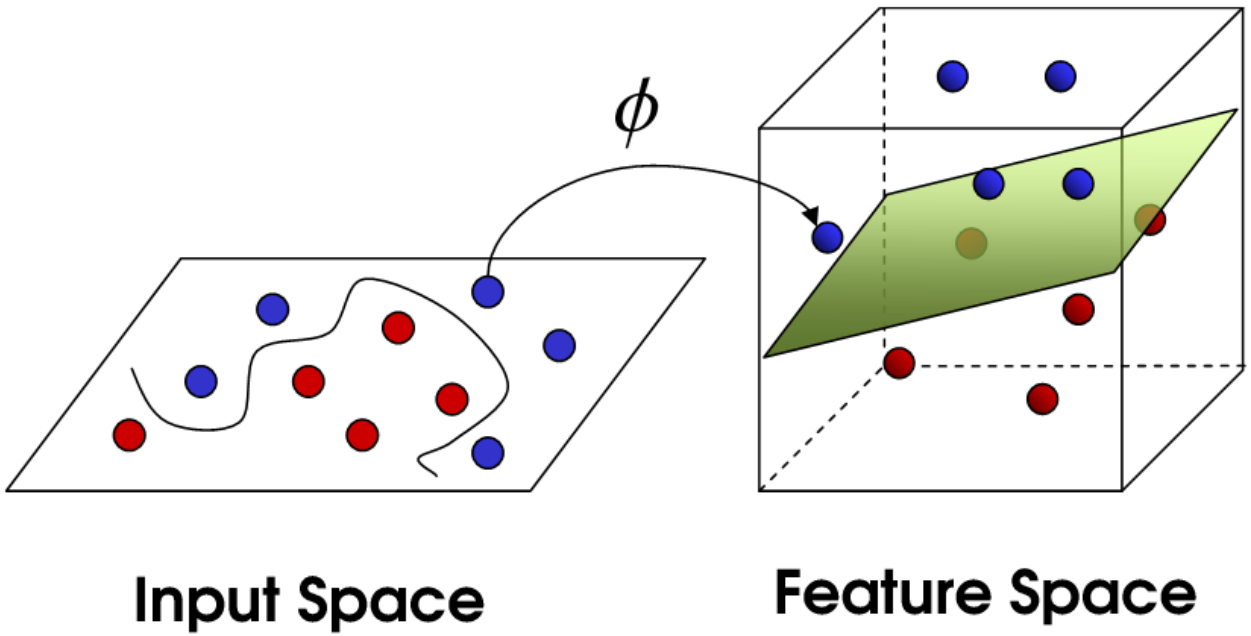
$$\mathbf{w}^T\Phi(\mathbf{x}_i) \geq 0 \quad \text{dla} \quad \mathbf{x}_i \in \mathbb{C}_1$$
$$\mathbf{w}^T\Phi(\mathbf{x}_i) < 0 \quad \text{dla} \quad \mathbf{x}_i \in \mathbb{C}_2$$

granica decyzyjna zdefiniowana jest równaniem

$$\mathbf{w}^T\Phi(\mathbf{x}) = 0$$

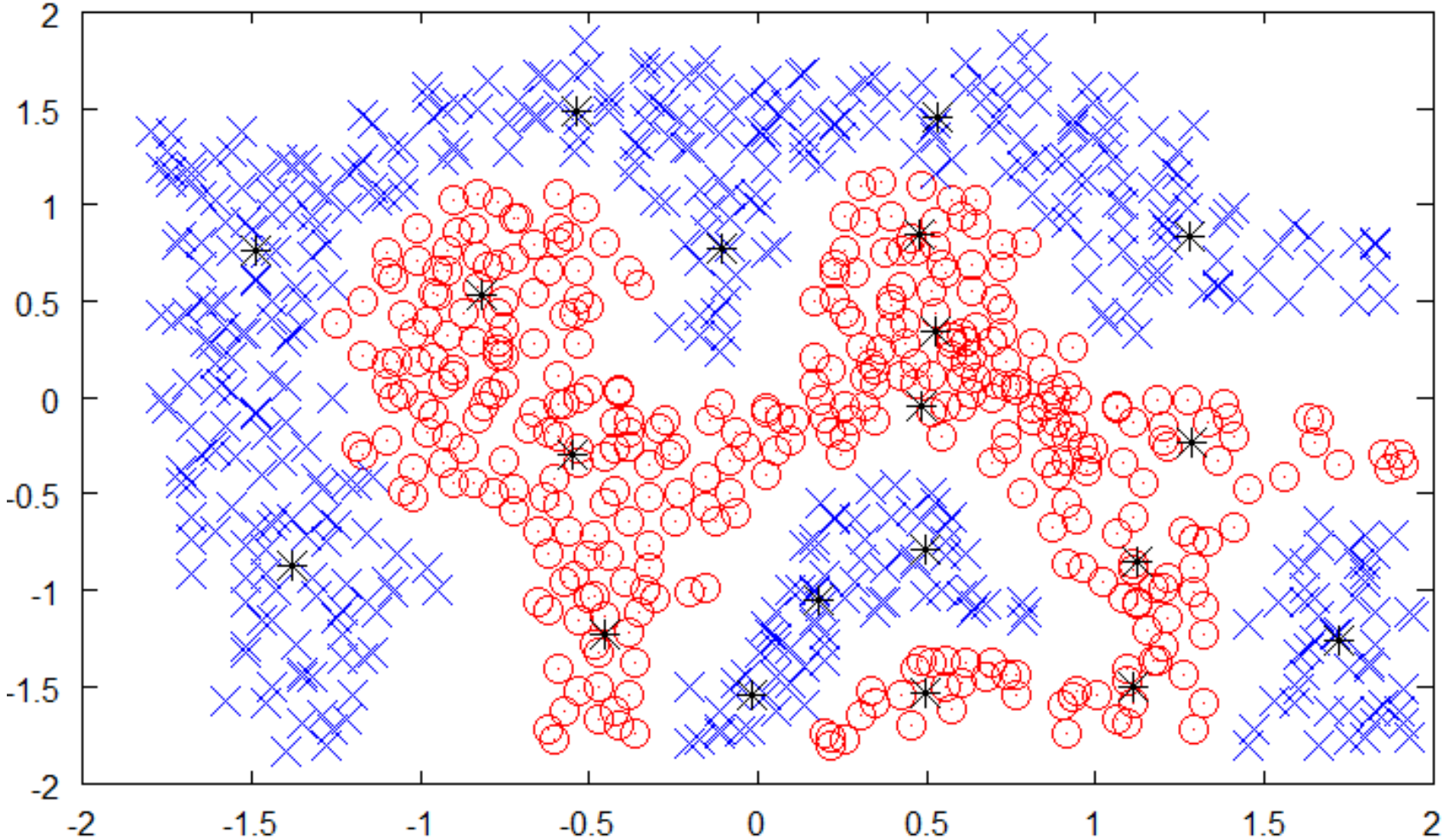
Przy dostatecznie dużej wymiarowości przestrzeni do której rzutujemy wzorce prawdopodobieństwo separowalności liniowej rośnie do 1.

Projekcja do przestrzeni cech



☞ *Julien Vitay, Neurocomputing*

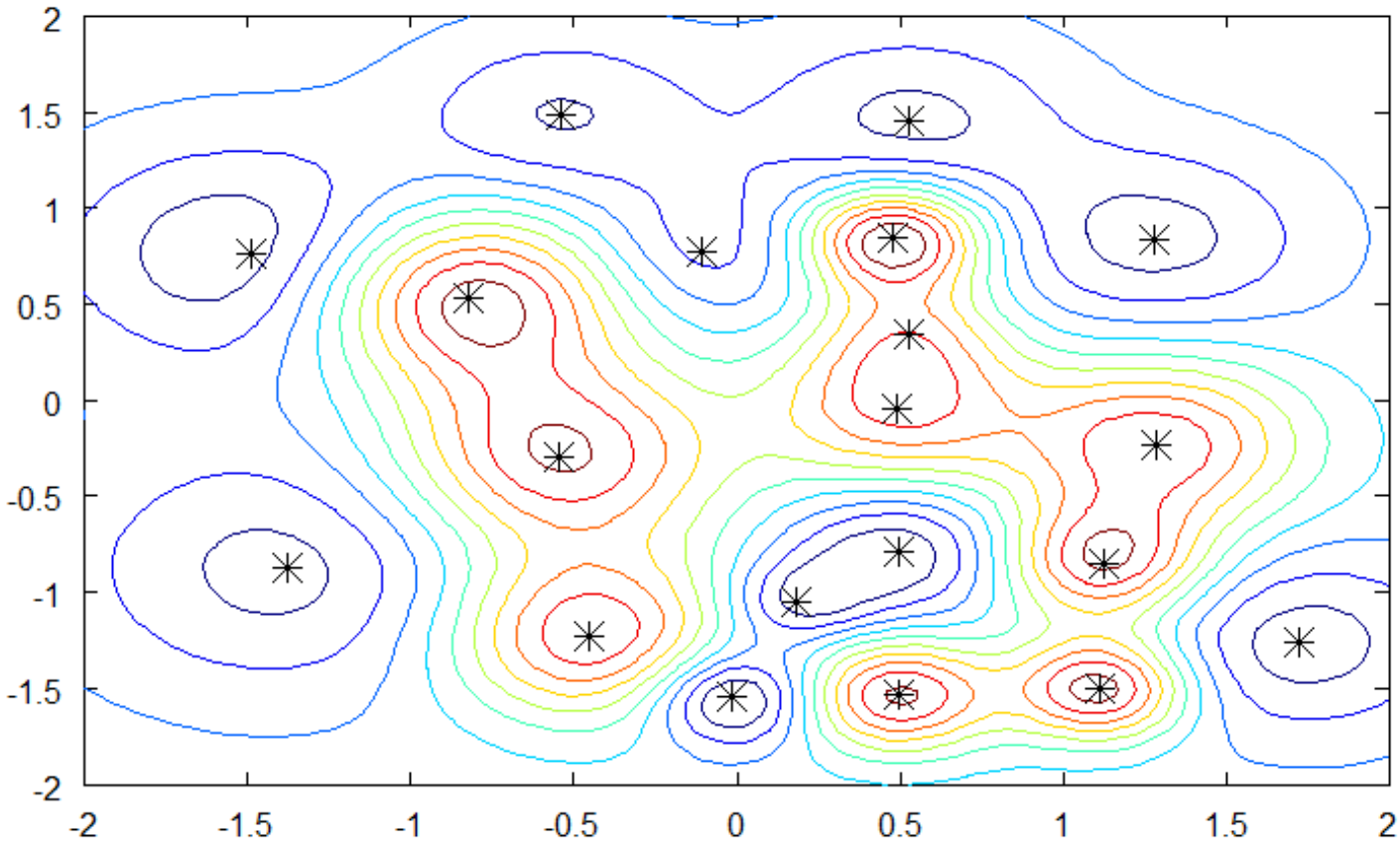
Przykład: 2 klasy



Rys: Chris McCormick, Radial Basis Function Network (RBFN) Tutorial

Przykład: 2 klasy

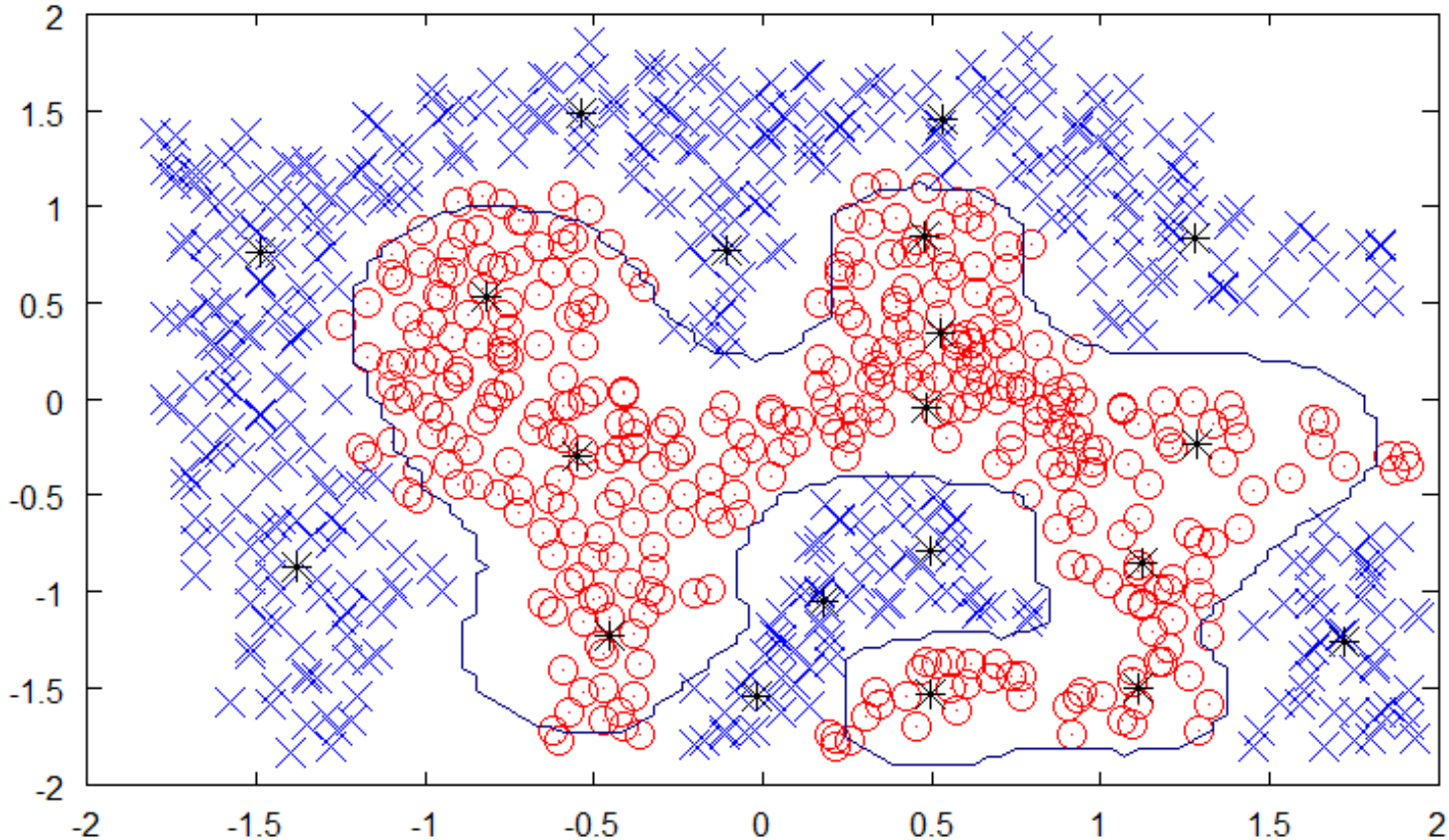
Wartości dla klasy 1, najczęściej wagi powiązane z funkcjami radialnymi dla klasy 1 mają wartości dodanie a dla klasy 2 - ujemne



Rys: Chris McCormick, Radial Basis Function Network (RBFN) Tutorial

Przykład: 2 klasy

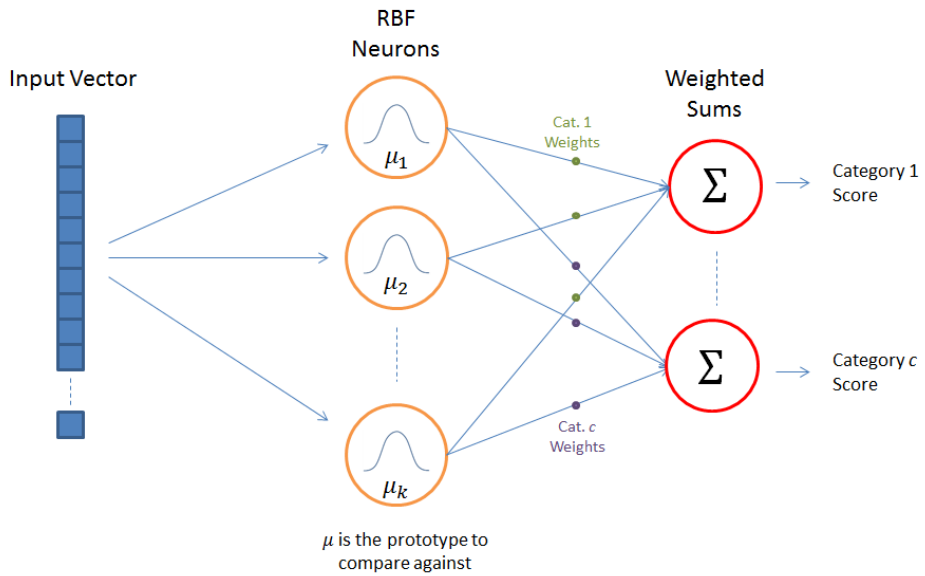
Granica decyzyjna



Rys: Chris McCormick, Radial Basis Function Network (RBFN) Tutorial

Sieć RBF

- jedna warstwa ukryta z radialnymi finkcjami + wyjśca liniowe
- parametry: wagi $\mathbf{w}$, centra $\mathbf{c}_i$, dyspersja σ_i (lub pełna macierz Σ), liczba funkcji radialnych K



Rys: Chris McCormick, Radial Basis Function Network (RBFN) Tutorial

Trening RBF

Różne strategie uczenia:

- Trening 2 etapowy:
  - najpierw ustawienie funkcji bazowych (centra i dyspersje)
  - potem rozwiązanie układu równań $\mathbf{HW} = \mathbf{Y}$
- Możliwe jednoczesne uczenie centrów, dyspersji i wag, np. za pomocą metod gradientowych (wsteczna propagacja)
- Inicjalizacja początkowych położeń centrów: losowa, klasteryzacja, samoorganizacja, probabilistyczna
- Inicjalizacja dyspersji: wartość stała, dobór zależnie od gęstości danych w różnych rejonach, średnie odległości od wektorów z innych klas, ...

Ustalenie centrów - różne strategie

- losowe równomierne pokrycie przestrzeni wejściowej - może nie oddawać specyfiki problemu
- w problemie aproksymacji ustawiamy centra w miejscach minimum i maksimum a następnie usuwamy wzorce z otoczenia tych centrów a resztę rozmieszczemy równomiernie wśród pozostałych wzorców
- dla klasyfikacji ustalamy centra funkcji bazowych w pobliżu granic decyzyjnych lub wewnątrz skupisk wektorów należących do wspólnej klasy
- wybieramy losowy podzbiór K wzorców treningowych - prosta ale skuteczna metoda
- ustalenie centrów w procesie uczenia nadzorowanego lub nienadzorowanego: klasteryzacja, samoorganicazcja, LVQ, ...

Ustalenie dyspersji - różne strategie

- wymagane gładkie odwzorowanie, rozmycie pełni rolę regularyzacji
- „pola recepcyjne" wszystkich funkcji bazowych powinny pokrywać cały obszar danych wejściowych
- pola recepcyjne sąsiadujących funkcji bazowych powinny nakrywać się w niewielkim stopniu
- rozmycie σ jednakowe dla wszystkich funkcji np. (Haykin, 1994):

$$\sigma = \frac{d}{\sqrt{2K}}$$

gdzie K ilość funkcji bazowych, d maksymalna odległość pomiędzy centrami. Funkcja Gaussa przybiera wówczas postać:

$$\varphi(\|\mathbf{x} - \mathbf{c}_i\|) = e^{-\frac{K\|\mathbf{x}-\mathbf{c}_i\|^2}{d^2}}$$

- rozmycie równe średniej odległości od sąsiadujących centrów

Ustawienie dyspersji - rózne strategie

- średnia odległość euklidesowa wektorów treningowych od najbliższego centrum

$$\sigma_k = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} \|\mathbf{x}_i - \mathbf{c}_k\|$$

gdzie m to liczba wektorów $\mathbf{x}_i$ przypisanych do centrum $\mathbf{c}_k$.

- σ_i równe odległości euklidesowej od najbliższego sąsiedniego centrum klastra (Tarasenko, 1994)
- uwzględniając odległość P najbliżej położonych centrów sąsiadujących funkcji radialnych (gdzie zwykle $P \leq 3$) (Moody, 1989)

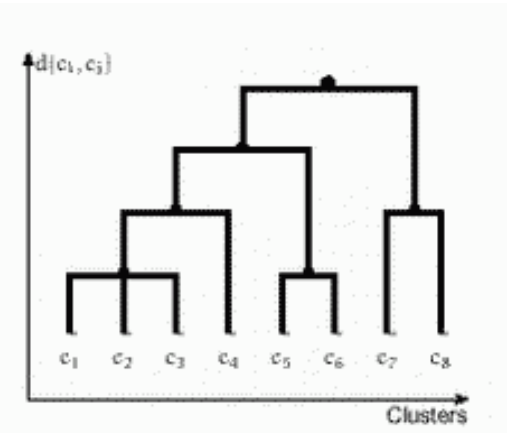
$$\sigma_i = \sqrt{\frac{1}{P} \sum_{i=1}^{P} \|\mathbf{c}_i - \mathbf{c}_k\|^2}$$

Incjalizacja RBF: klasteryzacja

Inicjalizacja centrów funkcji radialnych w centrach skupisk (klastrów) uzyskanych za pomocą algorytmów klasteryzacji (analizy skupień).
Przykład: metoda dendrogramów, algorytm k-średnich

Metoda dendrogramów:

1. przypisz każdy $\mathbf{x}_i$ do odrębnego klastra
2. połącz najbliższą parę klastrów $\mathbf{x}_i$ i $\mathbf{x}_j$ w jeden klaster
3. powtarzaj punkt 2 aż do uzyskania zadowalającej liczby klastrów lub gdy najmniejsza odległość między klastrami przekroczy ustalony poziom



Odległość między klastrami może być definiowana na wiele sposobów, np. minimalna odległość między obserwacjami z różnych klastrów

Incjalizacja RBF: klasteryzacja

Algorytm k-średnich

1. Rozmieść k centrów $\mathbf{c}_i$ równomiernie w przestrzeni wejściowej lub losowo wybierając k obserwacji ze zbioru treningowego
2. Dla każdego centrum $\mathbf{c}_i$ znajdź zbiór wszystkich punktów $\mathbf{x}_j$ leżących najbliżej tego centrum
3. Aktualizuj położenie centrum $\mathbf{c}_i$ ustawiając je w punkcie wyznaczonym przez średnią położeń punktów przypisanych do danego centrum

$$\mathbf{c}_i(k+1) = \frac{1}{N_i} \sum_{j=1}^{N_i} \overline{\mathbf{x}}_j(k)$$

4. Powtarzaj dwa ostatnie kroki aż do uzyskania zbieżności

☞ Clustering Demo

Inicjalizacja RBF: samoorganizacja

Metoda on-line k-średnich: inicjalizacja centrów funkcji radialnych przez samoorganizację metodami uczenia konkurencyjnego

1. Wybierz losowo k wektorów $\mathbf{c}_i$
2. Dla przypadku $\mathbf{x}$ ze zbioru uczącego znajdź najbliższe centrum $\mathbf{c}_j$ (zwycięzcę)
3. Zmień położenie centrum $\mathbf{c}_j$ zwycięzcy przesuwając je w kierunku punktu $\mathbf{x}$

$$\mathbf{c}_i(t+1) = \mathbf{c}_i(t) + \eta_t(\mathbf{x} - \mathbf{c}_i(t))$$

4. Powtarzaj kroki 2 i 3 określoną liczbę razy lub do uzyskania zbieżności

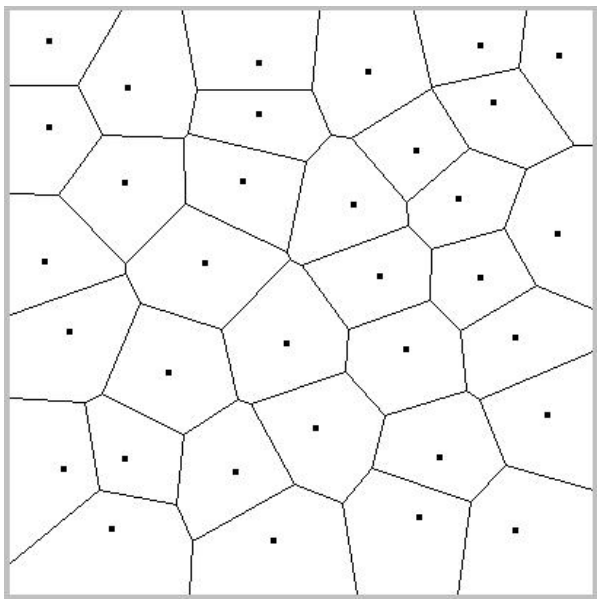
Stała uczenia η_t powinna zanikać ze wzrostem liczby iteracji t

$$\eta_t = \frac{\eta_0}{1 + \frac{t}{T}}$$

gdzie T to maksymalna liczba iteracji a η_0 - początkowa wartość

Diagram Voronoi

W drodze samoorganizacji przestrzeń dzielona jest na obszary Voronoi z centrum funkcji radialnej osadzonym w każdej komórce definiującymi teselację



Trening RBF: metoda probabilistyczna

Zał: rozkład równomierny danych w zbiorze treningowym, diagonalna macierz skalująca $\mathbf{\Sigma}$
Funkcja radialna $\varphi_i(\mathbf{x})$ reprezentuje prawdopodobieństwo warunkowe, że $\mathbf{x}$ należy do klastra w centrum $\mathbf{c}_i$

$$\varphi_i(\mathbf{x}) = e^{-\frac{1}{2}(\mathbf{x}-\mathbf{c}_i)^T\mathbf{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x}-\mathbf{c}_i)}$$

Wszystkie centra $\mathbf{c}_i$ oraz rozmycia $\mathbf{\Sigma}_i$ optymalizowane są równocześnie

$$\mathbf{c}_i(k+1) = \frac{\mathbf{c}_i(k) + \eta_k(\mathbf{x}\varphi_i(\mathbf{x}) - \mathbf{c}_i(k))}{(1-\eta_k) + \eta_k\varphi_i(\mathbf{x})}$$

$$\mathbf{\Sigma}_i(k+1) = \frac{\mathbf{\Sigma}_i(k) + \eta_k\left(\varphi_i(\mathbf{x})[\mathbf{x}-\mathbf{c}_i(k)][\mathbf{x}-\mathbf{c}_i(k)]^T - \mathbf{\Sigma}_i(k)\right)}{(1-\eta_k) + \eta_k\varphi_i(\mathbf{x})}$$

Współczynnik uczenia maleje w czasie $\eta_k = \frac{\eta_0}{k}$, gdzie $\eta_0 \in [0,1]$
Trening wag $\mathbf{w}_i$ warstwy wyjściowej odbywa sie po ustaleniu parametrów funkcji radialnych (np. jak wczesniej z rozwiązania układu równań)

Uczenie metodami gradientowymi

Minimalizacja funkcji błędu

$$E = \sum_{i=1}^{N} \left(y_i - f(\mathbf{x}_i)\right)^2 = \sum_{i=1}^{N} \left(y_i - \sum_{k=0}^{K} w_k \varphi_k(\|\mathbf{x}_i - \mathbf{c}_k\|) \right)^2$$

dla funkcji gusowskiej i metryki euklidesowej metodą największego spadku gradientu

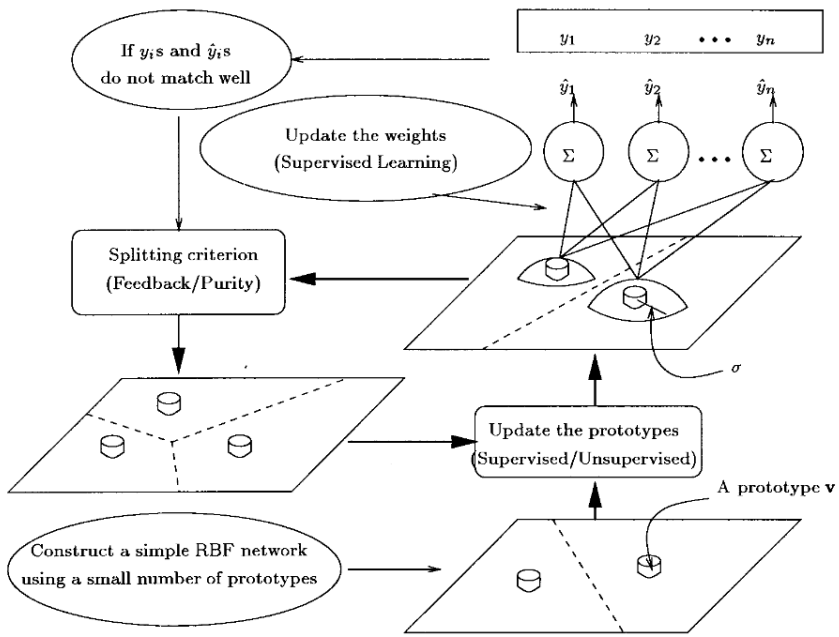
$$\Delta w_i = -\eta \frac{\partial E}{\partial w_i} = -\eta (y - f(\mathbf{x})) \varphi_i(\mathbf{x})$$

$$\Delta c_{ji} = -\eta \frac{\partial E}{\partial c_{ji}} = -\eta (y - f(\mathbf{x})) w_j \varphi_j(\mathbf{x}) \frac{(x_i - c_{ji})}{\sigma_j^2}$$

$$\Delta \sigma_j = -\eta \frac{\partial E}{\partial \sigma_j} = \eta (y - f(\mathbf{x})) w_j \varphi_j(\mathbf{x}) \frac{\|\mathbf{x} - \mathbf{c}_j\|^2}{\sigma_j^3}$$

Rozrastające się architektury RBF

- GAL (*Growing and Learning*)
- GrRBF (*Growing Radial Basis Function*)
- FEN (*Function Estimation Networks*)
- GCS (*Growing Cell Structures*)
- RAN (*Resource Allocation Networks*)



Nicolaos, Growing Radial Basis Neural Networks: MergingSupervised and Unsupervised Learningwith Network Growth Techniques, 1997

Supervised Growing Cell Structures (Fritzke)

1. Zainicjuj małą sieć RBF
2. Wytrenuj sieć dowolną metodą
3. Oblicz błąd związany z każdym neuronem radialnym e_i akumulując bład MSE sieci dla najlepiej dopasowanych centrów (zwycięzców położonych najbliżej przypadku uczącego $\mathbf{x}$)
4. Wstaw nową funkcję radialną w obszarze o największym błędzie

   $$\mathbf{c}_{new} = \frac{1}{2}(\mathbf{c}_m - \mathbf{c}_n)$$

   gdzie $\mathbf{c}_m$ to centrum z największym błędem,
   $\mathbf{c}_n$ to sąsiadujące centrum $\mathbf{c}_m$ (tj. położone w sąsiedniej komórce Voronoi) o największym błedzie
5. Powtarzaj dopóki błąd nie zmaleje do pożądanej wartości

Resorce-Allocating Network (RAN)

- RAN (Pratt, 1991) algorytm rozrostu sieci RBF
- Startuje od pustej warstwy ukrytej i dla danego wektora $\mathbf{x}_t$ dodawany jest nowy neuron jeżeli spełnione są kryteria „odkrywczości”

$$\|\mathbf{x}_t - \mathbf{c}_i\| \geq \epsilon(t)$$

$$\|\mathbf{e}(t)\| = \|\mathbf{y}_t - f(\mathbf{x}_t)\| > e_{min}$$

  gdzie $\mathbf{c}_i$ to centrum najbliższe $\mathbf{x}_t$
- Wrtość progu $\epsilon(t)$ maleje z każdym krokiem

$$\epsilon(t) = \max\{\epsilon_{max} e^{-\frac{t}{T}}, \epsilon_{min}\}$$

- zakładając, że w kroku t istnieje k neuronów, wówczas nowy neuron dodawany jest z parametrami

$$\mathbf{c}_{k+1} = \mathbf{x}_t, \qquad w_{k+1,j} = e_j(t), \qquad \sigma_{k+1} = \alpha\|\mathbf{x}_t - \mathbf{c}_i\|$$

- gdy kryteria „odkrywczości” nie sa spełnione to błąd jest korygowany aktualizacją parametrów (spadkiem gradientu)

Porównanie MLP vs RBF

MLP	RBF
nielokalne relacje, wymagają douczania	lokalne efekty, stabilność, niewrażliwość na odstające przypadki
jeden rodzaj parametrów (wagi)	kilka rodzajów parametrów: wagi, centra, rozmycia
trudna inicjalizacja	łatwa inicjalizacja
trudna interpretacja	łatwa interpretacja (prototypy)
uczenie tylko pod nadzorem	możliwe uczenie bez nadzoru
zawsze wie	czasami nie wie (przypadki w obszarach nie objętych polami recepcyjnymi)
BP dość skomplikowane dla wielu warstw	uczenie łatwe bo 1 warstwa
granica decyzji perceptronu: hiperpłaszczyzna	granica decyzyjna funkcji radialnej: hipersfera
aktywacja: ważona suma sygnałów $\mathbf{w}^T\mathbf{x}$	odległość od centrum funkcji bazowej $\|\mathbf{x}-\mathbf{c}\|$