# **Radial Basis Function Network**

### 1.RBF Network Hypothesis

在SVM中引入Gaussian Kernel就能在无限多维的特征转换中得到一条"粗壮"的分界线(或者高维分界平面、分界超平面)。 从结果来看,**Gaussian SVM就是将一些Gaussian函数进行线性组合**,而Gaussian函数的中心就位于Support Vectors上,最终得到预测模型 $g_{svm}(x)$ 。

$$g_{\text{SVM}}(\mathbf{x}) = \text{sign}\left(\sum_{\text{SV}} \alpha_n \mathbf{y}_n \exp\left(-\gamma \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_n\|^2\right) + b\right)$$

Gaussian SVM: find  $\alpha_n$  to combine Gaussians centered at  $\mathbf{x}_n$ ; achieve large margin in infinite-dimensional space, remember? :-)

Gaussian kernel也叫Radial Basis Function(RBF) kernel,即径向基函数。

首先,radial表示Gaussian函数计算结果只跟新的点x与中心点 $x_n$ 的距离有关,与其它无关。

basis function就是指Gaussian函数,最终的矩 $g_{sym}(x)$ 就是由这些basis function线性组合而成。

从另外一个角度来看Gaussian SVM。

首先,构造一个函数 $g_n(x)$ :

$$g_n(x) = y_n e^{-\gamma \left|\left|x - x_n
ight|
ight|^2}$$

指数项表示新的点x与 $x_n$ 之间的距离大小。

距离越近,即权重越大,相当于对 $y_n$ 投的票数更多;而距离越远,权重越小,相当于对 $y_n$ 投的票数更少。

其物理意义是新的点与 $x_n$ 的距离远近决定了 $g_n(x)$ 与 $y_n$ 的接近程度。如果距离越近,则 $y_n$ 对 $g_n(x)$ 的权重影响越大;如果距离越远,则 $y_n$ 对 $g_n(x)$ 的权重影响越小。

那么整体来说, $g_{svm}(x)$ 就由所有的SV组成的 $g_n(x)$ 线性组合而成,不同 $g_n(x)$ 对应的系数是 $\alpha_n$ ,最后由sign函数做最后的选择。这个过程很类型aggregation中将所有较好的hypothesis线性组合,不同的 $g_n(x)$ 有不同的权重 $\alpha_n$ 。

把 $g_n(x)$ 则做radial hypotheses, Gaussian SVM就是将所有SV对应的radial hypotheses进行线性组合 (linear aggregation)。

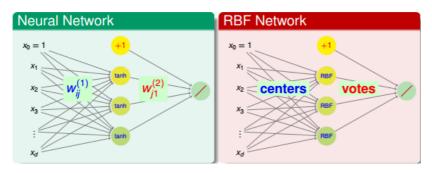
- · Gaussian kernel: also called Radial Basis Function (RBF) kernel
  - radial: only depends on distance between x and 'center' x<sub>n</sub>
  - · basis function: to be 'combined'
- let  $g_n(\mathbf{x}) = y_n \exp(-\gamma ||\mathbf{x} \mathbf{x}_n||^2)$ :

$$g_{\text{SVM}}(\mathbf{x}) = \text{sign}\left(\sum_{\text{SV}} \alpha_n g_n(\mathbf{x}) + b\right)$$

-linear aggregation of selected radial hypotheses

那么,Radial Basis Function(RBF) Network就是Gaussian SVM概念的延伸,目的就是找到所有radial hypotheses的linear aggregation,得到更好的网络模型。

之所以叫作RBF Network是因为它的模型结构类似于Neural Network。

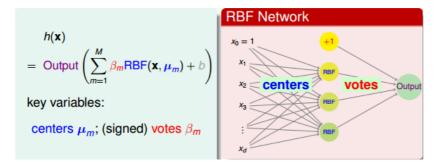


Neural Network与RBF Network在输出层基本是类似的,都是上一层hypotheses的线性组合(linear aggregation)。

但是对于隐藏层的各个神经元来说,Neural Network是使用内积(inner-product)加上tanh()函数的方法,而RBF Network是使用距离(distance)加上Gaussian函数的方法。

总的来说, RBF Network是Neural Network的一个分支。

- hidden layer different:
   (inner-product + tanh) versus (distance + Gaussian)
   output layer same: just linear aggregation
- RBF Network Hypothesis以及网络结构可以写成如下形式:



上式中, $\mu_m$ 表示每个中心点的位置,隐藏层每个神经元对应一个中心点; $\beta_m$ 表示每个RBF的权重,即投票所占比重。

对应到Gaussian SVM上,上式中的RBF就是Gaussian函数。

由于是分类问题,上式中的Output就是sign函数。

其中,RBF的个数M就等于支持向量的个数SV, $\mu_m$ 就代表每个SV的坐标 $x_m$ ,而 $\beta_m$ 就是在Dual SVM中推导得到的 $\alpha_n y_m$ 值。目标就是根据已知的RBF和Output,来决定最好的中心点位置 $\mu_m$ 和权重系数 $\beta_m$ 。

```
g_{\text{SVM}} for Gaussian-SVM

• RBF: Gaussian; Output: sign (binary classification)

• M = \#\text{SV}; \mu_m: SVM SVs \mathbf{x}_m; \beta_m: \alpha_m y_m from SVM Dual

learning: given RBF and Output, decide \mu_m and \beta_m
```

Mercer定理:一个矩阵是Kernel的充分必要条件是它是对称的且是半正定的,条件比较苛刻。除了Gaussian kernel还有Polynomial kernel等等。

Kernel实际上描述了两个向量之间的相似性,通过转换到z空间计算内积的方式,来表征二者之间的相似性。

而RBF实际上是直接使用x空间的距离来描述了一种相似性,距离越近,相似性越高。

因此,kernel和RBF可以看成是两种衡量相似性(similarity)的方式。Gaussian RBF即为二者的交集。

```
kernel: similarity via \mathcal{Z}-space inner product —governed by Mercer's condition, remember? :-) Poly(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = (1 + \mathbf{x}^T \mathbf{x}')^2 Gaussian(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \exp(-\gamma \|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|^2) Truncated(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = [\|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\| \le 1] (1 - \|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|)^2 RBF: similarity via \mathcal{X}-space distance —often monotonically non-increasing to distance
```

除了kernel和RBF之外,还有其它衡量相似性的函数。

例如神经网络中的神经元就是衡量输入和权重之间的相似性。

RBF Network中distance similarity是一个很好的定义特征转换的方法。

除此之外,还可以使用其它相似性函数来表征特征转换,从而得到更好的机器学习模型。

### 2.RBF Network Learning

RBF Network的Hypothesis可表示为:

$$h(\mathbf{x}) = \text{Output}\left(\sum_{m=1}^{M} \frac{\beta_m}{\beta_m} \text{RBF}(\mathbf{x}, \mu_m)\right)$$

其中 $\mu_m$ 表示中心点的位置。 $\mu_m$ 的个数M是人为决定的,如果将每个样本点 $x_m$ 都作为一个中心点,即M=N,则把这种结构称为full RBF Network。也就是说,对于full RBF Network,每个样本点都对最终的预测都有影响(uniform influence),影响的程度由距离

函数和权重 $\beta_m$ 决定。

如果每个样本点的影响力都是相同的,设为1, $\beta_m=1\cdot y_m$ ,那么相当于只根据距离的远近进行投票。最终将x与所有样本点的 RBF距离线性组合,经过sign函数后,得到最终的预测分类结果。这实际上就是aggregation的过程,考虑并计入所有样本点的影响力,最后将x与所有样本点的distance similarity进行线性组合。

- full RBF Network: M = N and each  $\mu_m = \mathbf{x}_m$
- physical meaning: each  $\mathbf{x}_m$  influences similar  $\mathbf{x}$  by  $\beta_m$
- e.g. uniform influence with  $\beta_m = 1 \cdot y_m$  for binary classification

$$g_{\text{uniform}}(\mathbf{x}) = \text{sign}\left(\sum_{m=1}^{N} \mathbf{y}_{m} \exp\left(-\gamma \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_{m}\|^{2}\right)\right)$$

—aggregate each example's opinion subject to similarity

full RBF Network的矩可以表示为:

$$g_{\text{uniform}}(\mathbf{x}) = \text{sign}\left(\sum_{m=1}^{N} \mathbf{y}_{m} \exp\left(-\gamma \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_{m}\|^{2}\right)\right)$$

上式中的Gaussian函数项,当x与样本点 $x_m$ 越接近的时候,其高斯函数值越大。

由于Gaussian函数曲线性质,越靠近中心点,值越大;偏离中心点,其值会下降得很快。

也就是说,在所有N个中心样本点中,往往只有距离x最近的那个样本点起到关键作用,而其它距离x较远的样本点其值很小,基本可以忽略。

因此,为了简化运算,我们可以找到距离x最近的中心样本点,只**用一个点来代替所有N个点**,最后得到的矩 $g_{nbor}(x)$ 也只由该最近的中心点决定。这种模型叫做nearest neighbor model,只考虑距离x最近的那一个"邻居"。

当然可以对nearest neighbor model进行扩展,如果不是只选择一个"邻居",而是**选择距离x最近的k个"邻居"**,进行uniformly aggregation,得到最终的矩 $g_{nbor}(x)$ 。这种方法通常叫做**k近邻算法**(k nearest neighbor)。

- $\exp(-\gamma \|\mathbf{x} \mathbf{x}_m\|^2)$ : maximum when  $\mathbf{x}$  closest to  $\mathbf{x}_m$ —maximum one often dominates the  $\sum_{m=1}^{N}$  term
- take y<sub>m</sub> of maximum exp(...) instead of voting of all y<sub>m</sub>
   —selection instead of aggregation
- · physical meaning:

$$g_{\text{nbor}}(\mathbf{x}) = \mathbf{y}_{m}$$
 such that  $\mathbf{x}$  closest to  $\mathbf{x}_{m}$ 

- -called nearest neighbor model
- can uniformly aggregate k neighbors also: k nearest neighbor

k nearest neighbor通常比nearest neighbor model效果更好,计算量上也比full RBF Network要简单一些。

k nearest neighbor与full RBF Network都是比较"偷懒"的方法。因为它们在**训练模型的时候比较简单**,没有太多的运算,但是在**测试的时候却要花费更多的力气**,找出最相近的中心点,计算相对复杂一些。

Full RBF Network有什么样的优点和好处。

考虑一个squared error regression问题,且每个RBF的权重为 $\beta_m$ 而不是简化的 $y_m$ 。目的是计算最优化模型对应的 $\beta_m$ 值。该hypothesis可表示为:

full RBF Network for squared error regression:

$$h(\mathbf{x}) = \text{Definit}\left(\sum_{m=1}^{N} \beta_{m} \text{RBF}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_{m})\right)$$

很明显,这是一个简单的线性回归问题,每个RBF都可以看成是特征转换。特征转换后的向量 $z_n$ 可表示为:

$$z_n = [RBF(x_n, x_1), RBF(x_n, x_2), \cdots, RBF(x_n, x_N)]$$

那么,根据之前线性回归介绍过的最优化解公式,就能快速地得到 $\beta$ 的最优解为:

$$\beta = (Z^T Z)^{-1} Z^T y$$

上述解的条件是矩阵 $Z^TZ$ 是可逆的。

矩阵Z的大小是NxN,是一个方阵。

而且,由于Z中每个向量 $z_n$ 表示该点与其它所有点的RBF distance,所以从形式上来说,Z也是对称矩阵。如果所有的样本点 $x_n$ 都不一样,则Z一定是可逆的。

· just linear regression on RBF-transformed data

$$\mathbf{z}_n = [\mathsf{RBF}(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_1), \mathsf{RBF}(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_2), \dots, \mathsf{RBF}(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_N)]$$

- optimal  $\beta$ ?  $\beta = (Z^TZ)^{-1}Z^Ty$ , if  $Z^TZ$  invertible, remember? :-)
- size of Z? N (examples) by N (centers)
   —symmetric square matrix
- theoretical fact: if xn all different, Z with Gaussian RBF invertible

根据Z矩阵的这些性质,可以对 $\beta$ 的解进行化简,得到:

$$\beta = Z^{-1}u$$

将 $\beta$ 的解代入矩的计算中,以 $x_1$ 为例,得到:

$$g_{RBF}(x_1) = \beta^T z_1 = y^T Z^{-1} z_1 = y^T [1 \ 0 \ \cdots \ 0]^T = y_1$$

模型的输出与原样本y1完全相同。

对任意的 $x_n$ ,都能得到 $g_{RBF}(x_n)=y_n$ 。因此, $E_{in}(g_{RBF})=0$ 。看起来,这个模型非常完美了,没有error。但是,机器学习中, $E_{in}=0$ 并非好事,很可能造成模型复杂度增加及过拟合。

full Gaussian RBF Network for regression:  $\beta = Z^{-1}y$ 

$$g_{\text{RBF}}(\mathbf{x}_1) = \boldsymbol{\beta}^T \mathbf{z}_1 = \mathbf{y}^T \mathbf{Z}^{-1} \text{ (first column of Z)} = \mathbf{y}^T \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \end{bmatrix}^T = y_1$$
  
 $-g_{\text{RBF}}(\mathbf{x}_n) = y_n, \text{ i.e. } E_{\text{in}}(g_{\text{RBF}}) = 0, \text{ yeah!! :-)}$ 

这种方法在某些领域还是很有用的。

比如在函数拟合(function approximation)中,目标就是让 $E_{in}=0$ ,使得原所有样本都尽可能地落在拟合的函数曲线上。

为了避免发生过拟合,我们可以引入正则项 $\lambda$ ,得到 $\beta$ 的最优解为:

$$\beta = (Z^T Z + \lambda I)^{-1} Z^T y$$

- called exact interpolation for function approximation
- · but overfitting for learning? :-(
- how about regularization? e.g. ridge regression for β instead
   —optimal β = (Z<sup>T</sup>Z + λI)<sup>-1</sup>Z<sup>T</sup>y
- seen Z?  $Z = [Gaussian(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_m)] = Gaussian kernel matrix K$

Z矩阵是由一系列Gaussian函数组成,每个Gaussian函数计算的是两个样本之间的distance similarity。 这里的Z与Gaussian SVM中的kernel K是一致的。

kernel ridgeregression中线性系数 $\beta$ 的解为:

$$\beta = (K + \lambda I)^{-1} y$$

比较一下kernel ridgeregression与regularized full RBF Network的分解,形式上相似但不完全相同。这是因为regularization不一样,在kernel ridgeregression中,是对无限多维的特征转换做regularization,而在regularized full RBF Network中,是对有限维(N维度)的特征转换做regularization。因此,两者的公式解有细微差别。

effect of regularization in different spaces:

kernel ridge regression:  $\beta = (K + \lambda I)^{-1} \mathbf{y}$ ; regularized full RBFNet:  $\beta = (\mathbf{Z}^T \mathbf{Z} + \lambda I)^{-1} \mathbf{Z}^T \mathbf{y}$ 

除此之外,还有另外一种regularization的方法

就是不把所有N个样本点都拿来作中心点,而是只选择其中的M个样本点作为中心点。

类似于SVM中的SV一样,只选择具有代表性的M个中心点。这样减少中心点数量的同时也就减少了权重的数量,能够起到 regularization的效果,避免发生过拟合。

recall:

$$g_{\text{SVM}}(\mathbf{x}) = \text{sign}\left(\sum_{\text{SV}} \alpha_m y_m \exp\left(-\gamma \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_m\|^2\right) + b\right)$$

—only '≪ N' SVs needed in 'network'

- next: M ≪ N instead of M = N
- effect: regularization

by constraining number of centers and voting weights

• physical meaning of centers  $\mu_m$ : prototypes

### 3.k-Means Algorithm

之所以要选择代表,是因为如果某些样本点很接近,那么就可以用一个中心点来代表它们。 这就是聚类 (cluster) 的思想,从所有N个样本点中选择少数几个代表作为中心点。

if  $\mathbf{x}_1 \approx \mathbf{x}_2$ ,

- $\implies$  no need both RBF( $\mathbf{x}, \mathbf{x}_1$ ) & RBF( $\mathbf{x}, \mathbf{x}_2$ ) in RBFNet,
- $\implies$  cluster  $\mathbf{x}_1$  and  $\mathbf{x}_2$  by one prototype  $\mu \approx \mathbf{x}_1 \approx \mathbf{x}_2$

聚类 (clustering) 问题是一种典型的非监督式学习 (unsupervised learning)。

它的优化问题有两个变量需要确定: 一个是分类的分群值 $S_m$ ,每一类可表示为 $S_1,S_2,\cdots,S_M$ ; 另外一个是每一类对应的中心点  $\mu_1,\mu_2,\cdots,\mu_M$ 。

那么对于该聚类问题的优化,其error function可使用squared error measure来衡量。

- clustering with prototype:
  - partition  $\{\mathbf{x}_n\}$  to disjoint sets  $S_1, S_2, \dots, S_M$
  - choose  $\mu_m$  for each  $S_m$
  - —hope:  $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2$  both  $\in S_m \Leftrightarrow \mu_m \approx \mathbf{x}_1 \approx x_2$
- · cluster error with squared error measure:

$$E_{\text{in}}(S_1, \dots, S_M; \mu_1, \dots, \mu_M) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^M [\mathbf{x}_n \in S_m] ||\mathbf{x}_n - \mu_m||^2$$

那么,目标就是通过选择最合适的 $S_1,S_2,\cdots,S_M$ 和 $\mu_1,\mu_2,\cdots,\mu_M$ ,使得 $E_{in}$ 最小化。对应的公式可表示为:

with  $S_1, \dots, S_M$  being a partition of  $\{\mathbf{x}_n\}$ ,

$$\min_{\left\{S_1,\cdots,S_{\mathbf{M}}:\mu_1,\cdots,\mu_M\right\}} \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^M \left[\!\left[\mathbf{x}_n \in S_m\right]\!\right] \|\mathbf{x}_n - \mu_m\|^2$$

- · hard to optimize: joint combinatorial-numerical optimization
- · two sets of variables: will optimize alternatingly

这是一个组合最佳化的问题,既要优化分群值 $S_m$ ,又要求解每一类的中心点 $u_m$ 。 所以,这个最小化问题是比较复杂、难优化的。通常的办法是对S和 $\mu$ 分别进行最优化求解。

首先,如果 $\mu_1,\mu_2,\cdots,\mu_M$ 是固定的,目标就是只要对所有的 $x_n$ 进行分群归类。这个求解过程很简单,因为每个样本点只能属于一个群S,不能同时属于两个或多个群。所以,只要根据距离公式,计算选择离 $x_n$ 最近的中心点 $\mu$ 即可。

if  $\mu_1, \dots, \mu_M$  fixed, for each  $\mathbf{x}_n$ 

- $[x_n \in S_m]$ : choose one and only one subset
- $\|\mathbf{x}_n \boldsymbol{\mu}_m\|^2$ : distance to each prototype

optimal chosen subset  $S_m$  = the one with minimum  $\|\mathbf{x}_n - \mu_m\|^2$ 

for given  $\mu_1, \dots, \mu_M$ , each  $\mathbf{x}_n$  'optimally partitioned' using its closest  $\mu_m$ 

然后,如果 $S_1,S_2,\cdots,S_M$ 是固定的,目标就是只要找出每个类的中心点 $\mu$ 。 根据上式中的error function,所有的 $x_n$ 分群是已知的,那么该最小化问题就是一个典型的数值最优化问题。 对于每个类群 $S_m$ ,利用梯度下降算法,即可得到 $\mu_m$ 的解。

if  $S_1, \dots, S_M$  fixed, just unconstrained optimization for each  $\mu_m$   $\nabla_{\mu_m} E_{\text{in}} = -2 \sum_{n=1}^N [\![ \mathbf{x}_n \in S_m ]\!] (\mathbf{x}_n - \mu_m) = -2 \left( \left( \sum_{\mathbf{x}_n \in S_m} \mathbf{x}_n \right) - |S_m| \mu_m \right)$ optimal prototype  $\mu_m = \text{average of } \mathbf{x}_n \text{ within } S_m$ 

for given  $S_1, \cdots, S_M$ , each  $\mu_n$  'optimally computed' as consensus within  $S_m$ 

中心点 $\mu_m$ 就等于所有属于类群 $S_m$ 的平均位置处。

经过以上的推导,得到了一个非常有名的一种unsupervised learning算法,叫做k-Means Algorithm。这里的k就是代表上面的M,表示类群的个数。

k-Means Algorithm的流程是这样的:

首先,随机选择k个中心点 $\mu_1, \mu_2, \cdots, \mu_k$ ;

然后,再由确定的中心点得到不同的类群 $S_1, S_2, \dots, S_k$ ;

接着,再由确定的类群计算出新的不同的k个中心点点

继续循环迭代计算,交互地对 $\mu$ 和S值进行最优化计算,不断更新 $\mu$ 和S值,直到程序收敛,实现 $E_{in}$ 最小化。

具体算法流程图如下所示:

#### k-Means Algorithm

- 1 initialize  $\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_k$ : say, as k randomly chosen  $\mathbf{x}_n$
- 2 alternating optimization of E<sub>in</sub>: repeatedly
  - 1 optimize  $S_1, S_2, ..., S_k$ : each  $\mathbf{x}_n$  'optimally partitioned' using its closest  $\mu_i$
  - 2 optimize  $\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_k$ : each  $\mu_n$  'optimally computed' as consensus within  $S_m$

until converge

k-Means Algorithm循环迭代一定会停止。

因为每次迭代更新, $\mu$ 和S值都会比上一次的值更接近最优解,也就是说 $E_{in}$ 是不断减小的。而 $E_{in}$ 的下界是0,所以, $E_{in}$ 最终会等于0, $\mu$ 和S最终能得到最优解。

把k-Means Algorithm应用到RBF Network中去。

首先,使用k-Means,得到原始样本的k个中心点。原始样本到k个中心点组成了RBF特征转换 $\Phi(x)$ 。

然后,根据上面介绍过的线性模型,由最优化公式解计算得到权重 $\beta$ 值。

最后,将所有的 $\Phi(x)$ 用 $\beta$ 线性组合,即得到矩 $g_{RBFNET}(x)$ 的表达式。

具体的算法流程如下所示:

#### RBF Network Using k-Means

- 1 run k-Means with k = M to get  $\{\mu_m\}$
- 2 construct transform  $\Phi(\mathbf{x})$  from RBF (say, Gaussian) at  $\mu_m$

$$\Phi(\mathbf{x}) = [\mathsf{RBF}(\mathbf{x}, \mu_1), \mathsf{RBF}(\mathbf{x}, \mu_2), \dots, \mathsf{RBF}(\mathbf{x}, \mu_M)]$$

- 3 run linear model on  $\{(\Phi(\mathbf{x}_n), y_n)\}$  to get  $\beta$
- **4** return  $g_{RBFNET}(\mathbf{x}) = LinearHypothesis (\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\Phi}(\mathbf{x}))$

这里使用了unsupervised learning (k-Means) 与autoencoder类似,同样都是特征转换 (feature transform) 的方法。

在最优化求解过程中,参数有k-Means类群个数M、Gaussian函数参数 $\lambda$ 等。

可以采用validation的方法来选取最佳的参数值。

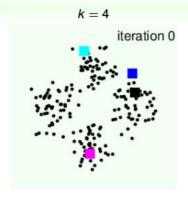
- using unsupervised learning (k-Means) to assist feature transform—like autoencoder
- parameters: M (prototypes), RBF (such as  $\gamma$  of Gaussian)

RBF Network: a simple (old-fashioned) model

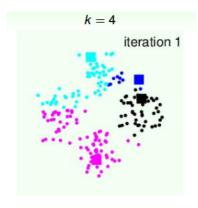
### 4.k-means and RBF Network in Action

第一个例子,平面上有4个类群,k=4。

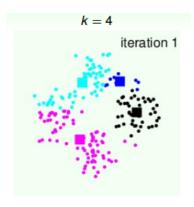
首先,随机选择4个中心点,如下图中四种颜色的方块所示:



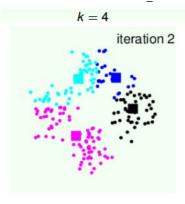
第一次迭代,由初始中心点,得到4个类群点的分布:



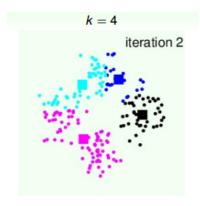
4个类群点确定后,再更新4个中心点的位置:



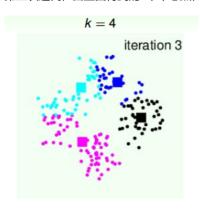
第二次迭代,由上面得到的4个中心点,再计算4个类群点的分布:



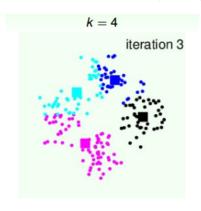
4个类群点确定后,再更新4个中心点的位置:



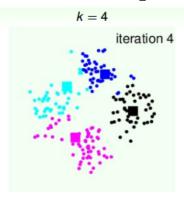
第三次迭代,由上面得到的4个中心点,再计算4个类群点的分布:



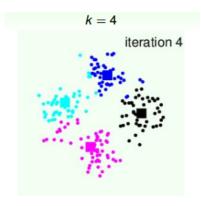
4个类群点确定后,再更新4个中心点的位置:



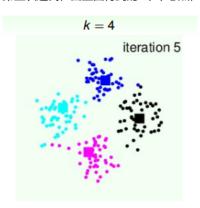
第四次迭代,由上面得到的4个中心点,再计算4个类群点的分布:



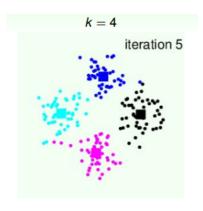
4个类群点确定后,再更新4个中心点的位置:



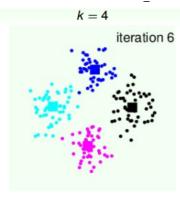
第五次迭代,由上面得到的4个中心点,再计算4个类群点的分布:



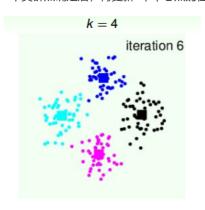
4个类群点确定后,再更新4个中心点的位置:



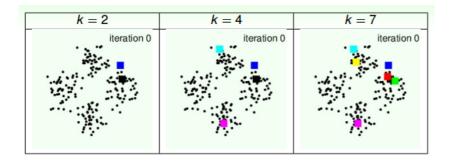
第六次迭代,由上面得到的4个中心点,再计算4个类群点的分布:



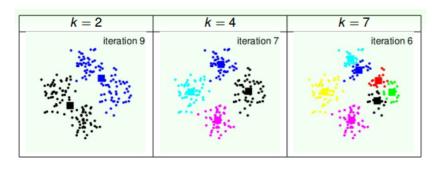
4个类群点确定后,再更新4个中心点的位置:



从上图我们可以看到,经过六次迭代计算后,聚类的效果已经相当不错了。 从另外一个角度来说,k值的选择很重要,下面看看不同的k值对应什么样的分类效果。



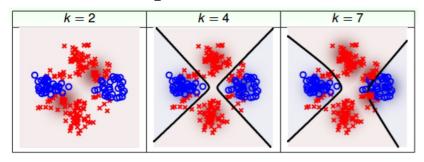
如上图所示,初始时,我们分别设定k为2,4,7,随机选择中心点位置。在经过多次迭代后,得到的聚类结果如下:



通过上面这个例子可以得出,不同的k值会得到不同的聚类效果。 初始中心点位置也可能会影响最终的聚类。

例如上图中k=7的例子,初始值选取的右边三个中心点比较靠近,最后得到的右边三个聚类中心点位置也跟初始位置比较相近。所以,**k值大小和初始中心点位置都会影响聚类效果**。

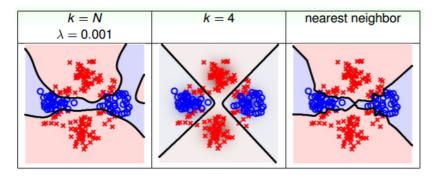
接下来,把k-Means应用到RBF Network中,同样分别设定k为2, 4, 7, 不同模型得到的分类效果如下:



很明显,k=2时,分类效果不是太好;k=4时,分类效果好一些;而k=7时,分类效果更好,能够更细致地将样本准确分类。 这说明了k-Means中k值设置得是否合理,对RBF Network的分类效果起到重要的作用。

再来看一个例子,如果使用full RBF Network进行分类,即k=N,如下图左边所示,设置正则化因子 $\lambda=0.001$ 。下图右边表示只考虑full RBF Network中的nearest neighbor。

下图中间表示的是k=4的RBF Network的分类效果。



从上图的比较中,可以发现full RBF Network得到的分类线比较弯曲复杂。 由于full RBF Network的计算量比较大,所以一般情况下,实际应用得不太多。

## 5.Summary

主要介绍了Radial Basis Function Network。RBF Network Hypothesis就是计算样本之间distance similarity的Gaussian函数,这类原型替代了神经网络中的神经元。

RBF Network的训练学习过程,其实就是对所有的原型Hypotheses进行linear aggregation。

然后,介绍了一个确定k个中心点的unsupervised learning算法,叫做k-Means Algorithm。这是一种典型的聚类算法,实现对原始样本数据的聚类分群。

接着,将k-Means Algorithm应用到RBF Network中,选择合适数量的中心点,得到更好的分类模型。

最后,列举了几个在实际中使用k-Means和RBF Network的例子,结果显示不同的类群k值对分类的效果影响很大。