

一种基于多目标优化的神经网络快速学习算法^{*}

王继成 吕维雪

(浙江大学生物医学工程研究所 杭州 310027)

摘要 本文根据多目标优化理论、认知科学和神经科学等学科的最新成果,提出了一种基于多目标优化的神经网络快速学习算法,实验结果表明,该学习算法可以解决目前神经网络普遍存在的学习时间长、容易陷入局部极小和网络结构优化难等问题。

关键词 神经网络,多目标优化,学习算法,网络优化,认知科学.

目前,神经网络在优化计算、模式识别、图象处理和智能控制等领域得到了越来越广泛的应用。^[1~3]其中前馈神经网络是应用最广泛的一种,它所采用的学习算法是反向误差传播(BP)算法。但是,人们在应用中发现BP算法有许多缺陷,主要是算法收敛速度慢、容易陷入局部极小和网络结构优化难等问题。虽然有许多学者提出了各种改进的途径^[4~6],但问题并没有得到满意的解决。其主要原因是:现有的简单人工神经网络模型对人脑结构的简单模拟极不完善,忽视了人脑中大量的功能核团(功能区)、皮质等高层结构;并且一个神经网络定义好了,只有在突触联系、阈值的变化上反映出网络的动态变化,且网络中的神经元数目和突触数目只能减少、不能增加,这些与人脑正好相反;采用传统的单目标优化方法来极小化误差能量函数,不可避免地会遇到局部极小问题。

事实上,多目标优化是人脑进行学习、决策的自然属性。为此,本文根据认知科学和神经科学等学科的最新研究成果,建立更适合人脑结构的新的神经网络模型;同时根据多目标决策与向量优化理论,提出一种基于多目标优化的神经网络快速学习算法,使神经网络在多目标函数指导下进行学习,从而求得最佳的神经网络结构,使神经网络的学习更好地模拟人脑的自然思维过程,从而解决现有神经网络学习算法中存在的学习时间长,易陷入局部极小等问题。为了进一步证实本文提出的神经网络模型及其快速学习算法的有效性和先进性,本文最后给出了基于神经网络的心电图分析系统的实验结果。从实验结果可以看出,本文提出的神经网络模型及其快速学习算法可以大大提高神经网络的学习效率和神经网络的心电图分析效率,同时为神经网络的结构优化提供了一个新的、可行的方法。

* 本文研究得到国家自然科学基金资助。作者王继成,1958年生,博士后,主要研究领域为人工智能,神经网络,认知科学。吕维雪,1930年生,教授,博士导师,主要研究领域为神经网络,图象重建,隐含信息提取。

本文通讯联系人:王继成,杭州 310027,浙江大学生物医学工程研究所或浙江大学计算机系人工智能研究所

本文 1995-04-24 收到修改稿

1 层次结构为基础的神经网络模型

现有的神经网络模型都是面向微观神经元水平的,且是绝对并行的同质系统(Homogeneous).然而,人脑中虽然存在微观神经元层次,但也存在大量的功能核团(功能区)、皮质等高层结构,而这些高层结构对人脑的思维过程更为重要.并且,绝对并行计算系统不可能解决全部认知问题.尽管目前神经网络研究中有一个新的方向,即混合神经系统(Hybrid Neural System),但由于该系统没有考虑到宏观的神经网络结构及统一定义和协调异质网络的行为等问题,所以不可能从根本上认识或解决人脑思维的真正机理,建立适合人脑结构的神经网络模型.

本节讨论的神经网络模型是一种基于层次结构的神经网络模型,即从不同的层次(神经元级、中间级和宏观级)描述人脑的结构组织及其功能,统一定义和协调各单元(神经元)以至整个大脑的结构和行为.具体的描述如下:

在宏观级上,神经网络系统是由若干个子神经网络组成的,即通过学习形成的若干个功能核团(功能区).从认知角度来看,子神经网络反映了现实世界的模板.因此,在宏观层次上,神经网络系统描述为:

$$NN(Function, SNN, SNNW, Inputs, Outputs, MOOF) \quad (1)$$

其中 $Function$ 是神经网络系统的功能描述; SNN 是子神经网络集合; $SNNW$ 是各子神经网络相互联接的拓扑结构及其联接权矩阵; $Inputs$ 是神经网络系统的输入信息集合; $Outputs$ 是神经网络系统的输出信息集合; $MOOF$ 是神经网络系统的多目标优化函数.

在中间级,子神经网络是由若干神经元组成的,子神经网络可以具有相同的或不同的激励函数和学习函数,学习函数和激励函数的选择是在子神经网络的多目标优化函数的指导下进行的.子神经网络在学习过程中,根据学习的样本和学习的不同阶段选择合适的学习函数,以提高学习速度.子神经网络的学习函数可表示为:

$$\delta_{ik} = g(y_{ik}) * (t_{ik} - y_{ik}) \quad (2)$$

其中 $g(y_{ik})$ 根据需要取 $\cos(y), \cosh(y), 1 - y^2, \tanh(y), \sin(y), e^{-y}$ 等(这里, $y = 1/(1 + e^{-x})$), t_{ik} 为神经元 i 在输入模式 k 时的期望输出值, y_{ik} 为神经元 i 在输入模式 k 时的实际输出值.

通过研究发现,当神经元 i 在输入模式 k 下的期望输出值为 1、实际输出值为 0 时,选择 $\cos(y), 1 - y^2, e^{-y}, 1 - \tanh(y)$ 作为学习函数可以获得高的收敛速度;同样,当神经元 i 在输入模式下的期望输出值为 0、实际输出值为 1 时,选择 $\cosh(y), \tanh(y), \sin(y), 1/\cos(y), \tanh(y^2), \sinh(y)$ 作为学习函数可以获得高的收敛速度.

因此,在中间层次上,子神经网络描述为:

$$SNN(i) (Function(i), NS(i), NW(i), Inputs(i), Outputs(i), MOOF(i), LF(i)) \quad (3)$$

其中 $Function(i)$ 是子神经网络 i 的功能描述; $NS(i)$ 是子神经网络 i 中神经元集合; $NW(i)$ 是子神经网络 i 中各神经元联接的拓扑结构及其联接权矩阵; $Inputs(i)$ 是子神经网络 i 的输入信息集合; $Outputs(i)$ 是子神经网络 i 的输出信息集合; $MOOF(i)$ 是子神经网络 i 的多目标优化函数; $LF(i)$ 是子神经网络 i 的学习函数集合.

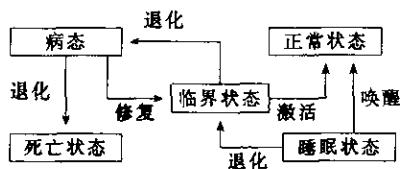


图1 神经元状态转换图

在神经元级上,神经元具有5种状态:睡眠状态(未参加人脑的思维活动)或超抑制状态、激活状态、病态、临界状态(介于病态和死亡状态之间的状态)、死亡状态。神经元状态的变化是由外界信息的作用和其内部的状态决定的。其状态转换如图1所示。

因此,在神经元级上,神经元描述为:

$$\text{Neuron}(i) \langle S(i), In(i), Out(i), AF(i), LF(i) \rangle \quad (4)$$

其中 $S(i)$ 是神经元 i 的状态; $In(i)$ 是神经元 i 的输入信息集合; $Out(i)$ 是神经元 i 的输出信息集合; $AF(i)$ 是神经元 i 的激励函数集合; $LF(i)$ 是神经元 i 的学习函数集合。

上面分别从微观层次、中间层次和宏观层次描述了人脑组织结构,该模型引入了神经元的状态及其转换规则,使得神经网络在学习过程中根据学习的任务和学习的要求能自动优化其结构,它不仅可以删除神经网络中多余的神经元和神经元间的联接,而且可以增加新的神经元和新的神经元联接以满足学习任务的要求,从而为神经网络结构的自动优化奠定了基础;同时,该模型引进了分级多目标优化函数及其决策理论,分别从不同的层次上优化神经网络的结构,加快神经网络的学习过程;在学习过程中,引入学习函数替换的方法,提高学习效率。更为重要的是,基于层次结构的神经网络模型串行处理与并行处理、同质神经网络与异质神经网络于一体,为研究人类思维机制和开发人工意识系统提供了一个有力工具。

2 分级多目标优化快速学习算法

多目标优化是人脑进行决策的自然属性,因此有必要把多目标优化理论引入到神经网络的学习过程,以解决目前神经网络由于侧重一个目标函数的优化而导致的学习时间长、局部极小等问题。

多目标优化问题可由下述数学问题描述:

$$\min x \in X f(x) = (f_1(x), f_2(x), \dots, f_q(x)) \quad (5)$$

式中 $f(x) = (f_1(x), f_2(x), \dots, f_q(x))$ 为多目标准则函数, x 为 n 维欧氏空间向量, X 为约束集或称可行区域。

在多目标优化问题中,一般由非劣解的概念来描述向量函数优化的解。一个可行决策向量 $x^* \in X$ 称为非劣解,如果不存在 $x \in X$ 使得 $f(x) \leq f(X^*)$ 及 $f(x) \neq f(X^*)$ 。非劣解集由 X^* 表示。

多目标优化问题(5)的非劣解可由参数问题:

$$\min_{x \in X} \sum_{k=1}^q W_k \times f_k(x) \quad (6)$$

求出。在凸目标函数和凸约束的情况下, x^* 完全由 $W_i \in W$ (这里, $W \equiv \{W_i \in R^q \text{ s. t. } W_i > 0, k=1, 2, \dots, q, \sum_{k=1}^q W_k = 1\}$) 变化决定。从而多目标优化问题(5)可由加权和标量化问题(6)的优化来解决。

在宏观级上,多目标优化神经网络就是使如下形式的能量函数极小化:

$$E = W_1 * E_f + W_2 * E_s + W_3 * E_t + W_4 * E_g \quad (7)$$

$$\begin{aligned}
 &= W_1 * (0.5 * \sum_p \sum_i (O_{pi} - d_{pi})^2) \\
 &\quad + W_2 * \sum_{j=1}^k (N(j) + W(j)) \\
 &\quad + W_3 * \sum_m \sum_n L(m, n) \\
 &\quad + W_4 * E_s
 \end{aligned}$$

其中 O_{pi} 为神经网络在第 p 个输入模式下的第 i 维实际输出, d_{pi} 为第 p 个输入模式下的第 i 维期望输出, $N(j)$ 为第 j 个子神经网络的神经元数, $W(j)$ 为第 j 个子神经网络的联接数(其联接权不等于零), $L(m, n)$ 为第 m 个子神经网络与第 n 个子神经网络的联接, E_s 为神经网络的连通性描述函数.

神经网络系统经过宏观层次上多目标优化后,使得神经网络既能完成指定的任务,又能把一个大的神经网络自动划分成若干个规模适当的子神经网络(形成若干个功能区).

在中间层次上,多目标优化子神经网络就是使如下形式的能量函数极小化:

$$\begin{aligned}
 E(i) &= W_1(i) * E_f + W_2(i) * E_b + W_3(i) * E_d \quad (8) \\
 &= W_1(i) * (0.5 * \sum_p \sum_i (O_{pi} - d_{pi})^2) \\
 &\quad + W_2(i) * (0.5 * \sum_j (\frac{\partial F_f}{\partial l_j})^2) \\
 &\quad + W_3(i) * (\sum_l \sum_k |W_{lk}|)
 \end{aligned}$$

其中 O_{pi} 为子神经网络输出层第 i 节点在第 p 输入模式下的实际输出; d_{pi} 为子神经网络输出层第 i 节点在第 p 输入模式下的期望输出; $\frac{\partial F_f}{\partial l_j}$ 是 E_f 关于输入层第 j 节点的导数, W_{lk} 是第 l 节点与第 k 节点间联接权.

(8)式中的第 1 项为一般 BP 学习算法的误差能量函数,主要反映了子神经网络对已学习过的样本分类能力;第 2 项为误差函数 E_f 关于每个输入节点的导数,主要反映了误差函数 E_f 对各输入节点信息变化的敏感程度,目的在于提高网络抗干扰的能力和对非学习过的样本的泛化能力;第 3 项为网络中各神经元间联接权随时间而遗忘的函数,目的在于使神经网络能不断学习新的知识,不至于因学习饱和而发生学习停滞的现象.

根据式(8)导出神经网络的学习方程为:

$$\begin{aligned}
 \frac{dW_{ij}}{dt} &= -\mu \frac{\partial E(i)}{\partial W_{ij}} \\
 &= -\mu (W_1(i) * \frac{\partial E_x}{\partial W_{ij}} + W_2(i) * \frac{\partial E_o}{\partial W_{ij}} + W_3(i) * \frac{\partial E_d}{\partial W_{ij}})
 \end{aligned} \quad (9)$$

其中 μ 为神经网络学习速率.

3 实验与讨论

为了验证基于多目标优化的神经网络快速学习算法的有效性和先进性,以及经过分级多目标优化后的神经网络的分类能力和泛化能力,作者用美国 MIT BME 中心提供的 MIT/BIH 心电图数据库中的部分心电图波形 T100、T105、T106、T108、T111、T112、T217、T219、T220、T221 进行了基于神经网络的分类研究,图 2 给出了各心电图的部分波形.

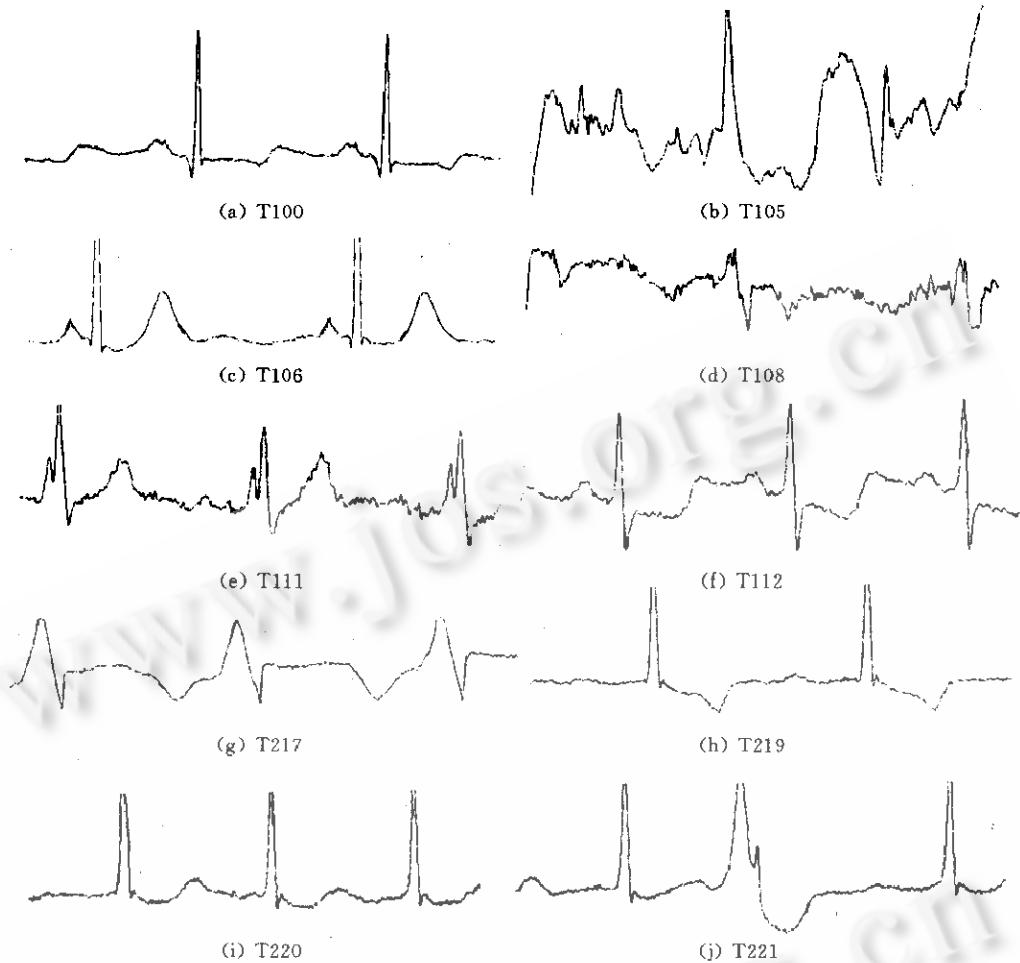


图 2 (a)~(j)部分心电图波形

实验中所有的参数设置如下:作为模式分类对象的心电图波形,各心搏取 R 波顶点之前 105 点,R 波顶点之后 165 点,对这 270 点数据进行抽用,即在 R 波前后 15 点全部使用,其它部分每隔 6 点采样,其结果为每一心搏 70 个数据.

基于 BP 神经网络的心电图分析系统,其神经网络由 3 层组成,即输入层、隐含层和输出层. 各层的单元数为: 输入层 70 个, 隐含层 20 个, 输出层 10 个. 表 1 列出了基于 BP 神经网络的心电图分析系统对 MIT 数据库中部分心电图的实验结果.

基于多目标优化神经网络的心电图分析系统,其神经网络开始的结构由 3 层组成,即输入层、输出层、隐含层. 各层的单元数分别为: 输入层 70 个, 隐含层 20 个, 输出层 10 个. 各层神经元间采用全联接方式.

经过宏观级上 280 个训练周期的多目标优化, 神经网络自动形成 3 个子神经网络(功能区), 通过分析, 得知这 3 个子神经网络分别对应于 P 波、QRS 波和 T 波分析. 它们的结构分别为: 子神经网络 1 的输入单元数为 20, 隐含单元数为 6, 输出单元数为 3; 子神经网络 2 的输入单元数为 20, 隐含单元数为 8, 输出单元数为 5; 子神经网络 3 的输入单元数为 30, 隐含单元数为 6, 输出单元数为 2. 心电图的分析系统由 P 波、QRS 波和 T 波分析的结果给出. 经过宏观级的多目标优化, 神经网络由全联接方式变成部分联接方式.

表 1 基于 BP 神经网络对 MIT 数据库中部分心电图的实验结果

心电数据	学习波形数	训练周期数	测试波形数	正确识别率(学习过的)	正确识别率(未学习过的)
T100	100	100 000	200	100%	65%
T105	100	100 000	200	100%	63%
T106	100	100 000	200	99%	62%
T108	100	100 000	200	97%	58%
T111	100	100 000	200	96%	59%
T112	100	100 000	200	88%	55%
T217	100	100 000	200	91%	57%
T219	100	100 000	200	90%	60%
T220	100	100 000	200	87%	61%
T221	100	100 000	200	89%	59%
平均	100	100 000	200	93.7%	59.9%

在中间层进行各子神经网络的优化时,由于引进了遗忘函数,所以各子神经网络的结构动态变化。各子神经网络分别经过了 240 个训练周期的学习后,其结构为:子神经网络 1 的输入单元数为 20,隐含单元数为 4,输出单元数为 3;子神经网络 2 的输入单元数为 20,隐含单元数为 6,输出单元数为 5;子神经网络 3 的输入单元数为 30,隐含单元数为 5,输出单元数为 2。各神经元间的联接由于某些值为零,在学习过程中而被删除,所以,训练结束后,神经元间为部分联接。

由于在神经元级引入了神经元状态(睡眠、正常、病态、临界、死亡)及其状态的转移规则,所以随着样本数据的增加,一旦神经网络的心电图分析结果不能满足要求,系统会自动加入神经元和增加联接,以获得所要求的心电图分析结果,且保持最佳的神经网络结构。表 2 列出了基于多目标优化神经网络的心电图分析系统对 MIT 数据库中部分心电图的实验结果。

表 2 基于多目标优化神经网络对 MIT 数据库中部分心电图的实验结果

心电数据	学习波形数	训练周期数	测试波形数	正确识别率(学习过的)	正确识别率(未学习过的)
T100	100	1 000	200	100%	90%
T105	100	1 000	200	100%	89%
T106	100	1 000	200	100%	86%
T108	100	1 000	200	98%	88%
T111	100	1 000	200	96%	84%
T112	100	1 000	200	97%	78%
T217	100	1 000	200	91%	79%
T219	100	1 000	200	93%	87%
T220	100	1 000	200	90%	74%
T221	100	1 000	200	92%	72%
平均	100	1 000	200	95.7%	82.7%

从表 1 和表 2 的实验结果可以看出,基于分级多目标优化神经网络的心电图分析系统可以大大提高心电图分析效率,缩短神经网络的学习时间,神经网络始终以最佳的结构满足心电图的分类要求,克服了一般 BP 算法所遇到的局部极小问题。

4 结束语

本文根据多目标优化理论,提出了一种基于多目标优化的神经网络快速学习算法。并通

过实验进一步说明了该算法可以自动生成神经网络的最佳结构,大大减少训练神经网络时间,从而为神经网络的实用化和研究人类思维机理提供了一个有效的方法.

参考文献

- 1 Lee T S. Structure level adaptation for artificial neural networks. Kluwer Academic Publisher, 1991.
- 2 Bartlett E B. Dynamic node architecture learning, an information theoretic approach. *Neural Networks*, 1994, 7(1):129~140.
- 3 Intrator N. Feature extraction using an unsupervised neural network. *Neural Computation*, 1992, 4(1):98~107.
- 4 Nowlan S J, Hinton G E. Simplifying neural networks by soft weight-sharing. *Neural Computation*, 1992, 4(4):473~493.
- 5 Scalero R S. A fast new algorithm for training feedforward neural networks. *IEEE Signal Processing*, 1992, 40(1):202~211.
- 6 Perlovsky L I. Maximum likelihood neural networks for sensor fusion and adaptive classification. *Neural Networks*, 1991, 4(1):9~102.

A FAST NEW NEURAL NETWORK LEARNING ALGORITHM BASED ON MULTIOBJECTIVE OPTIMIZATION

Wang Jicheng Lü Weixue

(Biomedical Engineering Institute Zhejiang University Hangzhou 310027)

Abstract In this paper, a fast new neural network learning algorithm based on multi-objective optimization is presented according to the new research results of multiobjective optimization, cognitive science and neurology. The experiment results have shown that this algorithm can solve the problems of long learning time, local minima and difficult network optimization.

Key words Neural network, multiobjective optimization, learning algorithm, network optimization, cognitive science.