

玻兹曼机 (Boltzmann Machine) 与 自适应模式识别

阎 平 凡

(清 华 大 学)

摘 要

本文综述了最新出现的一种并行计算模型——玻兹曼机的基本原理;学习过程;模拟退火算法和它们在图象处理、模式识别等方面的应用。初步探讨了自适应模式识别算法与玻兹曼机学习过程的关系。

玻兹曼机 (Boltzmann Machine 简称为 BM) 是最近出现的一种计算模型^[1,2], 是一种基于约束传播的并行计算网络, 特别适用于人工智能中提出的一些问题。它具有很好的学习功能, 最近受到不少学者的重视^[3,4]。本文在综述 BM 的基本原理和模拟退火算法的基础上, 着重讨论它与模式识别中监督学习算法的关系。

一、BM 的基本原理

BM 的基本构成单元是大量的基本处理元件, 各单元之间由双向通路联结, 为简单计认为每一单元可取两个状态(用 1 和 0 表示)。取某一状态之概率是本单元连线上权值的大小及相邻单元状态的函数。权可为任意符号(正或负)的实数。这种结构适于处理包括众多“弱约束”的约束传播问题, 而这一类问题正是例如视觉信息处理中的典型问题。每一单元处于 0 或 1 可以表示拒绝或接受某一假设, 而连线上的权则可理解为两个假设间的弱约束。权为正表示它们互相支持, 或者说一个假设被接受意味着另一假设应接受的可能性增大; 权为负则相反。

上述作用与 A. Rosenfield 等提出的“松弛法” (Relaxation Method)^[5,6]很相似, 可看作是一种随机松弛过程。Hummel 和 Zucker 曾证明^[7]对这一类网络存在一种价值函数, 逐次减少此价值函数可使网络进入平衡状态。与此同时, Hopfield 指出^[8]对网络的每一状态可赋给一个“能量”来代表价值函数。各单元的作用总朝着减少总体能量的方向。如果某些单元由外部强制箝位于某种状态(这相当于加上输入), 系统的作用是寻找与这种输入兼容的最小总能量状态。能量可理解为约束被违反的程度, 于是能量最小表示约

束被最大程度的满足。网络某一状态的能量可写为

$$E = - \sum_{i < j} w_{ij} S_i S_j + \sum_i \theta_i S_i \quad (1)$$

其中 w_{ij} 是单元 i 与 j 间连线上的权; S 表示状态, 取 1 或 0; θ_i 为 i 单元之阈值。这样每个单元状态的变化给总能量的影响为

$$\Delta E_i \triangleq E_{i(0)} - E_{i(1)} = \sum_j S_j w_{ji} \quad (2)$$

Hopfield 所提的确定性模型可用作存储器, 每一局部能量最小状态用以代表存储的向量。BM 是基于统计模型的, 为避免陷入局部极小点可借助噪声的作用, 允许从能量较小的状态转入能量较大的状态。其搜索过程与物质的退火过程相似, 简单说, 如 ΔE_i 是按式(2)定义的能量变化, 单元 i 取 $S = 1$ 的概率取为

$$p_i = \frac{1}{1 + \exp(\Delta E_i/T)} \quad (3)$$

其中 T 理解为温度, 可控制噪声的大小。

如各单元都按式(3)确定自己取某一状态的概率, 网络最后可达“热平衡”。平衡时取某两种状态(A 与 B)的概率之比服从 Boltzmann 分布。

$$\frac{P_A}{P_B} = \exp[-(E_A - E_B)/T] \quad (4)$$

其中 P_A 是取状态 A 之概率, 这一比值与到达热平衡状态之路径无关, 达到平衡并不意味着系统各单元之状态不再改变, 而是其状态的概率分布已定, 状态仍在变化之中。

二、模拟退火算法

自从 Kirkpatrick 等人提出了统计物理与组合最优化问题的相似性^[9,10]后, 模拟退火 (Simulated Annealing 简称为 SA) 算法受到许多人重视并已广泛用于解决实际问题^[11-13]。

统计物理指出, 在一定的温度 T_k 下, 系统将自发地趋于热平衡, 平衡后所处状态是随机的, 处于状态 X_i 的概率满足 Boltzmann 分布。

$$p_i(T_k) = C_k \exp(-E_i/T_k),$$

其中

$$C = \frac{1}{\sum_{j=1}^N \exp(-E_j/T_k)}$$

可见温度越低时, 系统处于较小能量值的概率越大。当温度趋于 0 时, 系统处于最小能量状态的概率趋于 1。

为了使物质具有理想的规则晶格结构(对应于能量最小的状态), 应先加热到足够高的温度, 然后再缓慢地逐步降低温度, 使得在降温过程中物质都处于平衡状态, 这样直到温度接近绝对零度, 这一过程就是退火过程。物理实验已表明, 退火过程能求得最低或接近最低能量状态。如何在计算机上模拟这一过程, 可用 Metropolis 提出的一种抽样方

法^[44], 经过迭代稳定于 Boltzmann 分布.

SA 寻优的基本思路是: 将目标函数比作物质体系的能量 E ; 将可行解比作物质体系的状态. 按上述退火过程的方法, 当 $T \rightarrow 0$ 时能相当精确地求得目标函数的最优值. 此时温度 T 是控制参数, 要求初始温度 T_0 足够高, 且温度下降足够缓慢, 其大致步骤为

- 1) 从某一高温 T_0 开始, 随机地选初态 X_0 , 计算相应目标函数(能量) $E(X_0)$;
- 2) 在 X_0 基础上随机移到一新态 X_1 , 计算 $\Delta E = E(X_1) - E(X_0)$;
- 3) 若 $\Delta E < 0$, 则接受 X_1 , 否则, 计算 $p' = \exp\left(\frac{\Delta E}{T}\right)$, 同时产生随机数 $\xi \in [0, 1]$;
- 4) 若 $\xi < p'$ 则接受 X_1 , 否则仍停在 X_0 , 回到第 2 步;
- 5) 若已达最优状态则终止. 否则, 降到较低温度, 重复以上过程.

对 SA 算法的数学模型, 重要参量(最高最低温度、降温的速度、随机抽样的方法等)的选择、收敛性和计算复杂性的分析已有许多研究工作^[15-23]. SA 算法已用于图象复原^[19,24]、纹理图象分割^[25,26]、运动图象分割^[27]、编码设计^[28], 并获得了较好效果. 在一些典型的组合优化问题中, 如生产排序、计算机电路设计等已得到了应用^[29,30]. 国内也有人¹⁾对 SA 算法做了较系统的研究. 文献[46]较详细地介绍了求多峰连续函数极值的算法.

三、BM 的学习过程

BM 的一个突出特点是它的学习能力, 它可按客观环境修改权值使得系统能体现出环境的内在信息. BM 中的单元有两组, 一组是(非空的)可见单元集合, 另一组是不可见单元集合(特殊情况下可以为空). 可见单元是系统与环境的联系, 它们都与不可见单元相连, 但互相之间没有联系. 在训练过程中可见单元集合可箝位到给定状态(代表环境输入). 不可见单元与环境没有直接联系, 它们之间是相连的. 正是由于有了不可见单元, BM 才能抓住环境的内在信息. 可见单元又分为输入单元和输出单元, 训练的目的在于当将输入按某一模式箝位并使系统退火时, 在输出端应有对应该模式的输出状态, 并且即使在输入加上不包含在训练集中的样本时, 系统亦应有正确输出.

一个学习周期分两个阶段, 正阶段与负阶段, 然后随之以权值调整. 在正阶段输入与输出单元都按给定信息箝位. 例如, 在输入单元给以训练样本的特征向量, 输出单元则加上该样本应属类别的信号, 给足够时间让 BM 退火到平衡状态; 用 p^+ 表示在正阶段平衡后可见单元状态之概率分布密度. 在负阶段输出单元自由, 给足够时间达平衡, p^- 表示此时可见单元状态之概率密度. p^+ 与 p^- 都与各连线之权值有关, 对已正确训练了的系统, 不管输出单元是否箝位, 它们的概率分布应相同. 这意味着 p^+ 与 p^- 也相同, 我们用 Kullback 的信息度量^[32]表示两个概率密度之间的距离,

$$G = \sum_{\alpha} p^+(\alpha) \ln \frac{p^+(\alpha)}{p^-(\alpha)}. \quad (5)$$

1) 蔡小强, 基于统计物理的组合优化方法; 理论及应用, 清华大学博士论文, 1988.

通过调节权值可减小 G , 且有^[3]

$$\frac{\partial G}{\partial w_{ij}} = -\frac{1}{T} (p_{ij}^+ - p_{ij}^-). \quad (6)$$

p_{ij}^+ 为 I/O 都箝位时 i, j 都为 1 之平均概率; p_{ij}^- 为输出自由时的上述概率. 可见为使 G 最小, 权变化量应与 $\Delta p_{ij} = p_{ij}^+ - p_{ij}^-$ 成正比

$$\begin{aligned} \Delta w_{ij} &= \varepsilon \Delta p_{ij}, \text{ 也可写为} \\ w_{k+1} &= w_k + \varepsilon \Delta p_{ij}. \end{aligned} \quad (7)$$

把 Δp_{ij} 看作 G 之梯度, 上式与自适应调节的公式相似.

四、BM 与监督学习

监督学习在模式识别中是一个重要问题^[33,34], 其目的是当类分布密度未知不能直接建立判别函数时, 通过样本的训练建立判别函数. 监督学习方法大体上分为两类, 第一类是由训练样本去估计类条件密度, 然后用 Bayes 决策分类; 第二类是通过学习直接建立判别函数. 后一种可通过对各个训练样本的分类结果逐步修改参数, 因而又被称为自适应模式识别^[35]. 第二类的算法又有两种, 确定性的(类似于感知器算法)和随机逼近的方法. 在确定性的方法中, 只有当样本被错分时才调整参数, 而在随机性方法中每遇到一个样本都可能要修正参数, 我们注意的是最后一种方法.

也可以从学习自动机的角度研究监督学习过程. 简单说来可看为随机自动机与环境形成一个闭环系统, 自动机从其行动集合中选取一个行动, 此行动作用于环境, 环境给予一个评价并反馈给自动机, 自动机修改自己的决策规则以选择更合适的行动以便增加成功的概率. 这相当于在分类空间中随机搜索判别函数, 有关自动机的定义及算法可参阅文献[36—40].

最近 A. Barto 与 P. Anandan 提出一种相关奖惩学习算法 A_{R-p} , 可以概括以上各种方法^[41].

令 $A = \{a^{(1)}, \dots, a^{(r)}\}$ 表示行动集合, 环境接受到行动 a_k 后给出评价 $b_k \in B = \{1, -1\}$, 设决策规则的参数为 $\theta \in R^n$, 其决策规则不是输入的确定性函数, 而是 $\theta^T x_k + \eta_k$ 的函数. 其中 x_k 为输入; η 为独立同分布的随机变量, 各变量的分布形式用 ψ 表示, 参数 θ 的修正规则为

$$\theta_{+1} - \theta_k = \begin{cases} -\rho_k \{E[a_k | \theta_k, x_k] - b_k a_k\} x_k, & \text{若 } b_k = 1; \\ -\lambda \rho_k \{E[a_k | \theta_k, x_k] - b_k a_k\} x_k, & \text{若 } b_k = -1. \end{cases} \quad (8)$$

其中 $0 \leq \lambda \leq 1$, $\rho > 0$ 为步长.

作者证明当 η 不同时可得到不同的算法, 例如若取 ψ 为阶跃函数, 即

$$\psi(r) = \begin{cases} 0, & r < 0; \\ 1, & r \geq 0. \end{cases}$$

此时 a_k 取决于 $\theta_k^T x_k$ 与确定性阈值之比较(因对所有 $k \geq 1$ 有 $\eta_k = 0$), 把 $\theta_k^T x_k$ 作为系统之“内部”状态用以确定期望值 $E[a_k | \theta_k, x_k]$, 即认为 $E[a_k | \theta_k, x_k] = \theta_k^T x_k$, 令 $\lambda = 1$, 类别标号 $z_k = b_k a_k$, 则(8)式变为

$$\theta_{k+1} = \theta_k - \rho_k [\theta_k^T x_k - z_k] x_k,$$

这就是随机逼近的训练公式。

在(8)式中如果把 $E[a_k | \theta_k, x_k]$ 理解为内部状态的表征,它相当于 BM 中可见元件不箝位的情况,即 p^- , $b_k a_k$ 是可见元件箝位的情况,即 p^+ , 将(7)式写为

$$w_{k+1} - w_k = -\varepsilon(p_{ij}^- - p_{ij}^+).$$

则不难发现(8)式与(7)式的共同之处。

作者还证明了要使 A_{R-p} 算法收敛,除其它条件外还要求 η_k 具有连续且严格单调的分布函数 ψ ,如选 ψ 为

$$\psi(r) = \frac{1}{1 + \exp(-r/T)},$$

此分布满足上述要求。与(3)式比较一下, T 仍理解为温度,可发现此算法与退火算法的相似之处,可以把 BM 看作一种随机自动机,它与环境的联系通过可见单元实现,它的学习算法也可归入 A_{R-p} 一类。

五、在语音及三维物体识别中的应用

像 BM 这种并行计算结构,可归入所谓的“Connection Machine”^[42],或“Connectionist”^[2],这种结构在感知信息处理上有其优越性。

文献[43]介绍了用 BM 作语音识别的模型,它用了 128 个输入单元、40 个不可见单元、8 个输出单元,按本文第四部分介绍的训练学习方式工作,对 11 个母音识别达到了相当好的结果。

文献[44]介绍了用 Connection Machine 识别纸叠三维物体的方案,其方法类似于用离散松弛法识别线划图^[45]。被识三维物体可以分级描述,根据 Hough 变换的思想,基元选为可在参数空间用少量参数表示的线段。计算网络中的节点代表图象空间中的线段和参数空间中的一组参数,若对应的两个节点间存在映射关系则二者是相联的,这样边线的存在与否可由它在参数空间中接受到的“选票数”确定。各线段的解释又可由合法的连接点来约束,通过约束传播过程找出待识物体的最合理解释。这方面的工作还可参考文献[47]。

六、结束语

虽然现代计算机具有惊人的功能,但在一些基本方面仍然远比不上人,例如:

- 1) 人的记忆可以存储巨大数量的各类知识,在需要时可容易的将有关知识取出;
- 2) 在众多事物中能识别出某一类细节不尽相同但又有共同性的事物的能力;
- 3) 学习能力,举一反三。

现有的主要靠串行逐条执行指令的计算机根本解决上述问题是困难的。BM 开辟了另一模型。它本质上是并行的,它的知识靠各单元的联结方式和连线上的权值体现,而不像传统的计算机那样在存储器中等待访问,这为解决上述问题提供了一个新的途径。与

这一方向有关的工作可参考文献[31,48,49].

本文的综述是很粗略的,在监督学习算法与 BM 学习关系方面的探讨更是非常初步的,希望能引起有关同志的兴趣,以推动这方面的研究工作.

参 考 文 献

- [1] Fahlman, S. E., and Hinton, G. E., Massively Parallel Architecture For AI: NETL, THISTLE, AND BOLTZMANN MACHINES, Computers For AI Applications, Benjamin Wah and G-J Li Ed. Computer Society Press, 1986. 486—490.
- [2] Fahlman, S. E., and Hinton, G. E. Connectionist Architectures for Artificial Intelligence, *Computer*, **21** (1987), 100—108.
- [3] Ackley, D. H., Hinton, G. E. and Sejnowski, T. J., A Learning Algorithm. for Boltzmann Machines, *Cognitive Science*, **9**(1985), 147—169.
- [4] 倉田耕治,ボルツマン・マシン,数理科学, **25** 卷 (1987) 第7号, 23—28。
- [5] Rosenfield, et al., Scene Labelling by Relaxation Operations, *IEEE Trans. SMC-6*(1976), 420—433.
- [6] Kittler, J. and Illingworth, J., Relaxation Labelling Algorithm—a Review, *Image and Vision Computing*, **3**(1985), 206—216.
- [7] Hummel, R. A. and Zucker, On the Foundations of Relaxation Labelling Processes, *IEEE Trans. PAMI-5* (1983), 267—287.
- [8] Hopfield, J. J., Neural Networks and Physical System with Emergent Collective Computational Abilities, *Proc. Nat'l Academy of Science U. S. A.* Vol. **79**, No. 8, (1982), 2554—2558.
- [9] Kirkpatrick, S. Gelatt, C. D. and Vecchi, M. R., Optimization by Simulated Annealing, *Science*, **220**(1983), 671—680.
- [10] Cerny, V. Thermodynamical Approach to the Traveling Saleman Problem: An Efficient Simulating Algorithm, *J. of Optimization Theory and Applications*, **45**(1985), No. 1.
- [11] Hajek, B., A Tutorial Survey of Theory and Application of Simulated Annealing, *Proc. 24th Conf. on Decision and Control*, December (1985), 755—760.
- [12] Romeo, F. et al., Research on Simulated Annealing at Berkeley, *Proc. IEEE Int. Conf. on Computer Design*, (1984), 652—657.
- [13] Johnson, D. S., Optimization by Simulated Annealing: A Tutorial, *Proc. 12th Int. Symp. on Math. Programming*, 1985.
- [14] Metropolis, N. et al., Equation of State Calculation by Fast Computing Machines, *J. Chem. Phys.*, **21**(1953), No. 6, 1087—1092.
- [15] Aarts, E. H. L. and Von Loarhoven P. J. M., Statistical Cooling: a General Approach to Combinatorial Optimization Problems, *Philips. J. Res.* **40**(1985), 193—226.
- [16] Kirkpatrick, S., Optimization by Simulated Annealing: Quantitative Studies, *J. of Stat. Phys.* **34**(1984), 957—986.
- [17] Gidas, B, Nonstationary Markov Chains and Convergence of the Annealing Algorithm, *J. of Stat. Phys.* **39** (1985), 73—113.
- [18] Vanderbilt, D. and Lonie, S. G, A Monte Carlo Simulated Annealing Approach to Optimization over Continuous Variables, *J. of Comput. Phys.*, **56**(1984), 259—271.
- [19] Geman, S. and Geman, D., Stochastic Relaxation, Gibbs Distribution and the Bayes Restoration of Images, *IEEE Trans. PAMI-6*(1984), 721—741.
- [20] Mitra, D. et al. Convergence and Finite Time Behavior of Simulated Annealing, *Proc. 24th Conf. Decision and Control*, December, (1985), 761—767.
- [21] Gelfand, S. B. and Mitter, S. K., Analysis of Simulated Annealing for Optimization, *ibid*, 779—787.
- [22] Bonomi, E. and Lutton, J. L., The N-city Traveling Salesman Problem: Statistical Mechanics and the Metropolis Algorithm, *SIAM Review*, **26**(1984), No. 4.
- [23] Schwarzschild, B. M., Statistical Mechanics Algorithm for Monte Carlo Optimization, *Physics Today*, May, (1982), 17—19.
- [24] Sontag, E. D., et al., Image Restoration and Segmentation Using the Annealing Algorithm, *Proc. 24th Conf. on Decision and Control*. December, (1985). 768—773.
- [25] Derin, H. and Elliott, H., Modeling and Segmentation of Noisy and Textured Images Using Gibbs Random

- Fields, *IEEE Trans. PAMI-9*(1987), 39—55.
- [26] Chee Sun Wan and Derin. H., Segmentation of Noisy Textured Images Using Simulated Annealing, ICPR, (1987), 563—566.
- [27] Murray, D. W. and Buxton, B. F., Scene Segmentation from Visual Motion Using Global Optimization, *IEEE Trans. PAMI-9*(1987), 220—228.
- [28] El Gemal A. A., et al., Using Simulated Annealing to Design Good Codes, *IEEE. Trans. IT-33*(1987), 116—123.
- [29] 谢平, 一种求解 Flowshop 排序问题的启发式算法——模拟退火寻优法, *系统工程学报*, No.1, (1987), 13—23.
- [30] Vecchi, M. P., et al., Global Wiring by Simulated Annealing, *IEEE Trans CAD-2*(1987), 215—222.
- [31] Cohen, M. A. and Grossberg, S., Masking fields: a Massively Parallel Neural Architecture for Learning, Recognizing, and Predicting Multiple Grouping of Patterned Data, *Applied Optics*, 26, 15(1987), 1866—1891.
- [32] Kullback, S., *Information Theory and Statistics*, New York, Wiley, 1959.
- [33] Duda, R. O. and Hart, P. E., *Pattern Classification and Scene Analysis*, New York, Wiley, 1973.
- [34] Sklansky, J. 等著, 阎平凡等译, *模式分类器与可训练机器*, 科学出版社, 1987 年 5 月.
- [35] Dattatreya, G. R. and Kanal, L., Adaptive Pattern Recognition with Random Costs and its Application to Decision Trees, *IEEE Trans. SMC-16*(1986), 208—218.
- [36] Narendra, K. S. and Thathacher M., Learning Automata——A Survey, *IEEE Trans. SMC-4*(1974), 323—334.
- [37] Mendel, J. M. and Fu K. S., *Adaptive Learning and Pattern Recognition*, New York, Academic, 1970.
- [38] Lakshminarayanan, S., *Learning Algorithms——Theory and Application*, Berlin, Springer Verlag, 1981.
- [39] Thathachar, M. and Sastray, D., Learning Optimal Discriminant Function Through a Cooperative Game of Automata, *IEEE Trans. SMC-17*(1987), 73—85.
- [40] Thathachar, M. and Sastray, P., A New Approach to the Design of Reinforcement Schemes for Learning Automata, *IEEE Trans. SMC-15*(1985), 168—175.
- [41] Barto, A. G. and Anaudan, P., Pattern Recognizing Stochastic Learning Automata, *ibid*, 360—375.
- [42] Hills, W. D., The Connection Machine, A Computer Architecture Based on Cellular Automata, *Computers for Artificial Intelligence Applications*, Benjamin Wah and G-J, Li Ed. Computer Society Press, (1986), 491—506.
- [43] Prager, R., Harrison, T. D. and Fallside, F., Boltzmann Machine for Speech Recognition, *Computer Speech and Language*, 1(1986), 1—20.
- [44] Sabbah, D., Computing with Connections in Visual Recognition of Origami Objects, *Cognitive Science*, 9 (1985), 25—50.
- [45] Kanade, T. A., A Theory of Origami World, *Artificial Intelligence*, 13(1980), 279—311.
- [46] Corana, A., et al., Minimizing Multimodal Function of Continuous Variables with the “Simulated Annealing” Algorithm, *ACM Trans. on Mathematical Software*. 13(1987), No. 3, 262—280.
- [47] Shastri, L., Massive Parallelism in Artificial Intelligence, *Applied Optics*, 26(1987), 1827—1844.
- [48] Lippmann, R. P., An Introduction to Computing with Neural Nets, *IEEE ASSP Magazine*, (1987), 4—22.
- [49] Carpenter, G. A. and Grossberg, S., A Massively Parallel Architecture for Self-Organizing Neural Pattern Recognition Machine, *Computer Vision, Graphics, Image Processing*, 37(1987).

BOLTZMANN MACHINE AND ADAPTIVE PATTERN RECOGNITION

YAN PINGFAN

(*Tsinghua University*)

ABSTRACT

The principle of a massively parallel computing model——Boltzmann Machine (BM), its learning process, simulated annealing algorithm, and its application to image processing and pattern recognition are surveyed in this paper. The relation between adaptive pattern recognition algorithm and the learning process of BM is also discussed briefly.

《自动化》杂志更名启事

由中国自动化学会主办的科普杂志《自动化》将从1989年第一期起,更名为《自动化博览》。

更名后,该杂志仍将保持过去的特色,并继续发扬其独特风格,以期使各界读者能在自动化领域中获得有益的知识与信息。我们期望,更名后的《自动化博览》将会受到广大读者的欢迎。

本刊面向社会各阶层人士,内容广泛,通俗易懂,欢迎集体和个人订阅。

《自动化博览》杂志由全国邮局发行,邮发代号 18-79。

《自动化》杂志社