

研究简报

基于结构分解的神经网络设计算法

魏海坤 宋文忠 徐嗣鑫

(东南大学自动化研究所 南京 210096 E-mail: hkwei@seu.edu.cn)

关键词 多层前向网, 泛化能力, 结构分解.

ALGORITHM FOR NEURAL NETWORKS DESIGN BASED ON STRUCTURE DECOMPOSITION

WEI Hai-Kun SONG Wen-Zhong XU Si-Xin

(Automation Institute of Southeast University, Nanjing 210096)

(E-mail: hkwei@seu.edu.cn)

Key words Multilayer feedforward neural nets, generalization ability, structure decomposition.

1 引言

一般认为,在给定样本的情况下,能复现训练样本的较小结构神经网络,有好的泛化能力.尽管剪枝算法、构造算法等方法所设计的神经网络具有较小的结构,但能否在此基础上进一步精简网络结构,以提高神经网络的泛化能力,是一个令人感兴趣的课题.针对这一问题,本文得出了一些关于神经网络结构分解的结论:一个多输出前向网可以分解成多个具有更少隐节点的单输出前向子网,因而整个结构分解系统会有更好的泛化能力.基于以上结论,还提出一种基于结构分解的权衰减法(Structure Decomposition based Weight Decay,简称 SDBWD).作者以煤灰结渣特性判别为例验证了该方法,获得较好的效果.

2 神经网络的结构分解原理及算法

2.1 神经网络的结构分解原理

作者以三层 BP 网为例讨论神经网络的结构分解,所得结论也可推广到多层 BP 网.

结论1. 结构为 $N_I-N_H-N_O$ 的多输出 BP 网可以分解为 N_O 个结构为 N_I-N_H-1 的单输出子网,且结构分解系统与原多输出 BP 网等价.

实际上,如果令各单输出子网的输入权矩阵等于原多输出 BP 网的输入权矩阵,且第 i 个子网的输出权矩阵(此时为一矢量)为原多输出 BP 网的输出权矩阵的第 i 列,则此结构分解系统与原多输出 BP 网具有完全相同的输入输出特性,因而两者等价.

结论2. 结构为 $N_I-N_H-N_O$ 的多输出 BP 网可以分解为 N_O 个单输出子网,且每个子网的隐节点数都不超过 N_H .

这是因为,对每个单输出子网来说,它们所需完成的“任务”的复杂性都低于多输出 BP 网,因为每个子网只需识别它所对应类的样本,而多输出 BP 网则需同时识别所有类样本.根据神经网络的算法复杂性理论^[1,2],各子网应该有更小的结构,即更少的隐节点.

由结论2,即使原来的 $N_I-N_H-N_O$ 神经网络已达到最小结构,如果各子网单独设计,在学习精度不变的前提下,每个子网的隐节点数也可能小于 N_H ,于是整个结构分解系统有比原多输出 BP 网更好的泛化能力.

结论3. 如果把多输出 BP 网的设计分解为多个单输出 BP 子网的设计,则结构分解系统可能会有更好的泛化能力.

2.2 基于结构分解的神经网络设计方法(SDBWD 方法)

假设待学习的样本共有 N_O 类.在 SDBWD 方法中,我们先设计 N_O 个规模较大的单输出 BP 网,然后把所有样本按它们的类别分为 N_O 类,把属于第 i 类的样本作为该类的正样本,而把不属于该类的所有样本都作为该类的负样本.然后以第 i 类样本对应第 i 个子网,用 Weigend 等人^[3]提出的权衰减法训练各个子网.训练一定次数后,与各冗余隐节点相连接的权值将衰减到零附近,删除这些权值,即可得到较为精简的 N_O 个子网.第 i 个子网训练时,误差函数为: $Err = Err_0 + \lambda \sum_j \frac{u_j^2}{1+u_j^2}$, 其中 $Err_0 = \sum_{j=1}^{N_s} (y_j^i - t_j^i)^2$, $u_j^2 = \frac{w_j^2}{w_0^2}$, w_0 为固定值, λ 的值需随着训练的进行而动态调整^[3].

整个 SDBWD 方法的具体步骤如下:

- 1) 选定各子网的初始神经网络规模,初始化其权值;
- 2) 把所有样本按它们的类别分为 N_O 类,属于第 i 类的样本作为该类的正样本,不属于该类的所有样本都作为该类的负样本;
- 3) 用权衰减法训练 N_O 个子网,直至满足误差精度,或达到一定训练次数;
- 4) 删除各子网中冗余的隐节点,即得到较精简的 N_O 个子网.

SDBWD 方法的初始网络结构选取也是一个重要的问题.比较合适的初始网络结构,应使得剪枝前的网络规模正好能够产生过拟合.可以根据 Amari^[4]的学习曲线理论得到合适的初始网络规模.根据这一理论,当神经网络中自由参数的数目 N_P 与训练样本数 N_S 之比 $N_P/N_S \geq 1$ 时,神经网络必然会产生过拟合.假定三层前向网中输入节点、隐节点和输出节点数分别为 N_I, N_H, N_O ,则网络中自由参数个数为 $N_P = N_I N_H + N_H N_O$,于是可以选定初始神经网络的隐节点数为 $N_H = \frac{N_S}{N_I + N_O}$.

3 试验

锅炉受热面的结渣直接影响着锅炉的安全运行.影响煤灰结渣的主要因素是煤灰中

各种氧化物的含量,即 SiO_2 、 Al_2O_3 、 Fe_2O_3 、 CaO 、 MgO 、 TiO_2 、 $\text{K}_2\text{O} + \text{Na}_2\text{O}$. 这里,以煤灰的上述七种氧化物含量(单位:%)作为输入,以煤灰的结渣度(分为严重结渣,轻度结渣和不结渣)作为输出,以神经网络为工具来分析煤灰的结渣特性. 初始样本共264个,其中严重结渣81个(第一类),轻度结渣68个(第二类),不结渣115个(第三类). 为了测试神经网络的泛化能力,作者把所有样本分成两部分:第一部分为训练样本共200个,其中第一类61个,第二类52个,第三类87个;第二部分(余下的64个)为测试样本.

作者用两种类型的学习系统完成上述分类,一种是结构为7-25-2的BP网,另一种为由两个单输出BP子网构成的结构分解系统,它们的具体结构按SDBWD方法设计. 两种类型的网络训练时,如果对单个样本的训练误差小于0.1则该样本训练正确. 当所有样本全部训练正确或训练次数达到30 000后停止学习. BP算法和SDBWD方法的学习率均为 $1.5e-4$,SDBWD方法中 $w_0=0.1$,训练后的两个子网隐节点数分别为13,11.

训练后的神经网络用于样本测试时,本文规定,对测试样本的输入 x ,如果普通BP网或结构分解系统的输出为 $[a, b]^T$,则当 $a < 0.5, b < 0.5$ 时, x 属于第二类;否则,当 $a \geq b$ 时 x 属于第一类, $a < b$ 时 x 属于第三类. 学习后的BP网和结构分解系统对测试数据的识别结果如表1所示. 表中 C_i 表示属于 C_i 类的样本数, C_{ij} 表示属于 C_i 类,但被识别为 C_j 类的样本数. 由表1可见结构分解系统比未分解时有更好的泛化能力.

表1 结构分解方法对测试数据的识别

	测试样本数:64									正确率
	C1 = 20			C2 = 16			C3 = 28			
	C11	C12	C13	C21	C22	C23	C31	C32	C33	
未分解系统	20	0	0	5	9	2	0	0	28	89.06%
结构分解系统	19	1	0	6	8	2	0	0	28	85.94%

4 讨论

应该指出,用结构分解方法设计神经网络的训练时间不会增加很多. 小原和博等人^[5]对用于多分类的多输出神经网络的研究发现,在学习过程中,每类样本的误差与所有样本的总误差并不同步减小. 因此,在学习的后阶段,虽然只有少数类样本尚未达到误差要求,用于训练的却依然是所有的样本,这极大的增加了训练时间. 所以他们建议对每类样本分别设定误差函数. 而本文恰好把多输出神经网络分解为多个单输出神经网络,于是每个子网都有自己的目标函数,这无疑加快了整个学习系统的学习.

参 考 文 献

- 1 Schmidhuber J. Discovering neural nets with low Kolmogorov complexity and high generalization capability. *Neural Networks*, 1997, **10**(5): 857~873
- 2 Pearlmutter B A, Rosenfield R. Chaitin-Kolmogorov Complexity and Generalization in Neural Networks. In: Proc. Advances in Neural Information Processing Systems 3. San Mateo:1991, CA: 925~931
- 3 Weigend A S, Rumelhart D E, Huberman B A. Generalization by Weight-Elimination with Application to Forecasting. In: Proc. Advances in Neural Information Processing Systems 3. San Mateo 1991: CA: 875~882
- 4 Amari S, Murata N, Muller K. Asymptotic statistical theory of overtraining and cross-validation. *IEEE Trans.*

Neural Networks, 1997, 8(5): 985~996

- 5 小原和博, 中村行宏. バックプロパゲーション. ニューラルネットへの学習セットの选择的提示法. 电学论 C, 1997, 117-C(9): 1281~1290

魏海坤 东南大学自动化研究所博士. 研究方向为: 神经网络的泛化理论和泛化方法.

宋文忠 东南大学自动化研究所教授、博士生导师. 研究方向为 DEDES、过程辨识和控制.

徐嗣鑫 东南大学自动化研究所教授. 研究领域为模糊控制、神经网络以及电厂 MIS 系统.

《自动化学报》征稿简则

一、《自动化学报》是中国自动化学会主办的高级学术期刊, 每年出版六期.

二、本刊刊载自动化科学与技术领域的高水平学术论文和科学研究成果. 内容包括: 1. 自动控制理论; 2. 系统理论与系统工程; 3. 自动化技术及其在国民经济各领域中的创造性应用; 4. 自动化系统计算机辅助技术; 5. 机器人与自动化; 6. 人工智能与智能控制; 7. 自动控制系统中的新概念、新原理、新方法、新设计; 8. 信息理论与信息处理技术, 模式识别; 9. 自动化学科领域的其它重要问题.

三、本刊发表的文章以论文和短文两种形式为主, 并不定期地发表综述与评论性文章、长论文、书刊评论、问题讨论、读者来信和国内外学术活动信息等.

四、本刊原则上只发表原始性稿件, 但不排除刊登已在国内外学术会议上发表或准备发表的优秀论文的可能性(对于此种情况, 作者必须如实说明).

五、作者投稿时需签署“作者承诺”.

六、来稿格式及要求

1. 来稿要求论点明确、论证充分、语言通顺、文字简练. 一般定稿时论文不超过 6000 字; 短文不超过 3000 字; 其它形式文章视具体内容由编辑部决定. 对重要成果进行系统、完整叙述的长论文字数可稍长. 长论文稿件, 作者在投稿时必须注明.

2. 稿件首页应包括下列内容: 标题; 作者姓名、工作单位、详细通讯地址(包括邮政编码)、E-mail、电话号码; 论文摘要; 关键词; 用英文书写的上述内容.

3. 论文和短文的文章结构请参照本刊最近发表的文章格式. 论文摘要在 200 字以内; 短文 100 字左右. 文中缩写词(中文或英文)须在首次出现时注明全称; 公式、图、表均须分别用阿拉伯数字全文统一编号.

4. 计量单位一律用国际单位, 即 SI 单位制. 名词术语必须规范化、标准化, 前后一致. 外国人名、地名、书刊名称除已通用者外一律用原文.

5. 参考文献按文中出现的先后次序排列, 文献如为期刊时, 按编号, 作者(姓在前如 Wiener L N, Kalman R E, Wang H.). 文章题目. 期刊名(外文可根据国际惯例使用缩写词), 年份, 卷号(期号): 页码顺序编排. 文献如为图书时, 则按编号, 作者(姓在前). 书名. 版次(初版不写). 出版地点: 出版者, 年份, 页码顺序排列. 文中未引用的文献不得列入参考文献栏目.

6. 来稿请用 A4 纸 1.5 倍行距打印.

七、作者必须对稿件内容的真实性和可靠性负责.

(下转 283 页)