

18

神经网络 学习算法 全局最优解

73-75

# BP 网络的全局最优学习算法

徐宜桂 史铁林 杨叔子

(华中理工大学机械工程学院 武汉430074)

TP18

**摘要** A new global optimization training algorithm for BP network is presented in this paper. This algorithm can solve some knotty problems such as local minimization and network oscillation, which result from the traditional gradient search algorithm, and have more high training efficiency, more simple and feasible application procedure than Simulated Annealing and Genetic Algorithm. As a example, a 2-2-1 neural network on XOR problem is trained with this algorithm, and the results is satisfactory.

**关键词** BP network, Global optimization, Training algorithm

## 一、概述

自从1985年,Rumelhart 和 McClelland 领导的 PDP 研究小组提出多层前馈网络的误差反传训练算法(即 BP 网)以来, BP 网络已成功地解决了语言识别,过程监控等工程领域中的大量问题,成为目前众多神经网络中应用最为广泛的代表性网络之一。然而,由于 BP 网络大多采用的是沿梯度下降的搜索求解算法,这就不可避免地出现了网络学习收敛速度慢,以及容易陷于局部极小等问题。此外,在具体实施过程中,有关参数如训练速率  $\eta$  和冲量系数  $\alpha$  的选取,只能凭实验和经验确定,而且一旦取值不当,

又会引起网络振荡,甚至导致网络麻痹以至不能收敛。

模拟退火和遗传算法可在一定程度上克服上述缺陷,但模拟退火方法在使用过程中要解决一些目前尚无理论指导依据的问题,如如何产生新的搜索状态,如何确立新状态的接受标准,如何确定退火温度的下降过程等等,且退火结束后以多大概率稳定在全局最优解也缺乏有力的理论依据。而遗传算法在使用时则要解决诸如如何找到通用且有效的编码方法,如何定义适应度函数,如何确定群体规模值以及交叉、变异发生概率值等参数取值问题,所有这些问题直接影响到模拟退火和遗传算法应用的成功与

表达的方式描述环境变化灵敏度知识,运用映射机制转换为内部表达形式。环境变化灵敏度知识的刻画很困难,环境特征的抽取是关键,这方面的研究将有力推动柔性推理的发展。

### 参考文献

[1]涂序彦,《人工智能及其应用》,电子工业出版社,1988

[2]Ameen Abu-Hanna and Wouter Janseijer, Modelling Domain Knowledge Using Explicit Conceptualization, IEEE Expert, October 1994

[3]萨师煊等,《数据库系统概念》,高等教育出版社,1983

[4]Jack W. Smith and Todd R. Johnson, A Stratified Approach to Specifying, Designing, and Building Knowledge System, IEEE Expert, June 1993

[5]Gregg R. Yost, Acquiring Knowledge in Soar, IEEE Expert, June 1993

[6]David. M. Steier et al., Combining Multiple Knowledge Sources in an Integrated Intelligent System. IEEE Expert, June 1993

[7]施鸿宝,《专家系统》,西安交通大学出版社,1990

[8]张文修,《不确定性推理原理》,西安交通大学出版社,1994

徐宜桂 博士生,副教授;史铁林 副教授,博士后;杨叔子,华中理工大学校长,科学院院士。

否,但又只能凭使用者的经验或经过实验确定,这就难以以为一般工程人员所接受和使用。而且模拟退火和遗传算法所花费的学习时间也是相当长的。

因此,寻求一种具有明确的理论指导依据,比较规范的应用步骤,较高的学习效率,以及能够保证得到全局最优解的BP网络学习算法,无疑有着十分重要的意义。本文即是对此进行了一个初步探索。其基本思想是:首先建立一个比较合理的BP网络误差度量函数 $E(\bar{W})$ , $\bar{W}$ 为网络权值组成的向量,进而采用目前已经比较成熟的求非线性函数总体极值的方法求解 $E(\bar{W})$ ,得到 $\bar{W}$ 值,从而完成BP网络的学习过程。

## 二、BP网络的学习过程

BP网络的学习过程由正向传播和反向传播组成。正向传播时,将训练样本集中的任一样本置于网络的输入层,经隐含层处理,在输出层得到该样本对应的输出值。反向传播时,则是根据输出值与期望值的误差调整网络的各个权值,以使其输出值与期望值误差在允许范围,整个学习过程按正向传播和反向传播循环反复进行,直至网络收敛。

按照正向传播过程,在网络输出层第 $j$ 个节点的输出值可表示为(以图1所示的二层网络为例):

$$y_j^k = F\left(\sum_b w_{bj} F\left(\sum_a w_{ab} x_a^k\right)\right) \quad (1)$$

式中: $x_a^k$ 表示训练样本中第 $k$ 个样本的第 $a$ 个分量, $w_{ab}$ 、 $w_{bj}$ 分别表示输入层与隐含层、隐含层与输出层之间的连接权值, $F(\cdot)$ 为节点转移函数,一般为sigmoid函数。

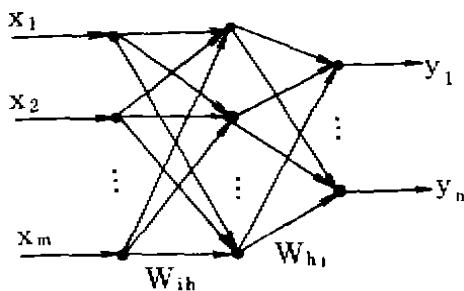


图1 BP网络

一般来说, $y_j^k$ 与其相应的期望输出值 $T_j^k$ 之间存在误差,故定义:

$$E_k(\bar{W}) = \frac{1}{2} \sum_j (T_j^k - y_j^k)^2 \quad (2)$$

为第 $k$ 个样本的误差函数,当样本集中有 $p$ 个样本时,则总的系统误差为:

$$E(\bar{W}) = \sum_k E_k(\bar{W}) / p = \frac{1}{2p} \sum_k \sum_j (T_j^k - y_j^k)^2 \quad (3)$$

为了表示输出层各节点输出的相对误差大小,一般将上式改写为

$$E(\bar{W}) = \frac{1}{2p} \sum_k \sum_j (1 - y_j^k / T_j^k)^2 \quad (4)$$

显然这是一个非线性函数,BP网络的学习过程(即求解权值 $w_{ab}$ 、 $w_{bj}$ 的过程)实质上就是非线性函数的极值求解过程,因而可以用求非线性函数总体极值的方法求解(4)式,从而得到网络的全局最优解 $\bar{W}^*$ 。

## 三、非线性函数总体极值求解算法

目前,求解非线性函数总体极值的代表算法有隧道函数法<sup>[1]</sup>,填充函数法<sup>[2]</sup>,压缩变换法<sup>[3]</sup>以及基于Monte-Carlo模拟计算的逐步逼近法<sup>[4][5]</sup>等。考虑到逐步逼近法算法相对简单,便于工程应用,故可作为求解(4)式的总体极值即BP网络全局最优解的算法。

根据文[4][5],逐步逼近法的基本思想如下:

首先定义 $\Omega_k = \{\bar{W} | E(\bar{W}) \leq c_k\}$ 为函数 $E(\bar{W})$ 在有界区域 $G$ 上对应于某一实数 $c_k$ 的有效作用区域。

由于 $E(\bar{W})$ 为非线性函数,有多个极小点,故 $\Omega_k$ 可以由多个不相连的区域组成。如图2所示, $\Omega_k$ 即由 $\Omega_{k1}$ 和 $\Omega_{k2}$ 组成。显然若有 $c_k \geq c_j$ ,则有 $\Omega_k \supseteq \Omega_j$ 。

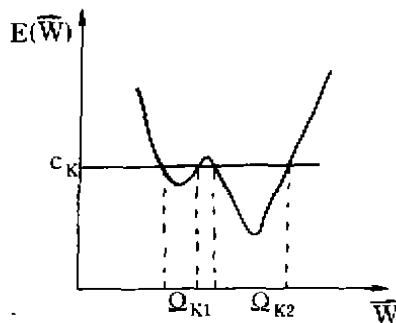


图2

若 $\Omega_k$ 非空,则 $E(\bar{W})$ 在 $\Omega_k$ 上的均值可表示为:

$$u_k(E(\bar{W}), c_k) = \frac{\int_{\Omega_k} E(\bar{W}) d\bar{W}}{\int_{\Omega_k} d\bar{W}} \leq c_k \quad (5)$$

进一步若令  $c_{k+1} = u_k(E(\bar{W}), c_k)$ , 当取  $k=1, 2, \dots$  时, 则可得到单调下降的实数序列  $\{c_k\}$ , 有效作用区域序列  $\{\Omega_k\}$  和均值序列  $\{u_k\}$ .

$$c_k = u_{k-1}(E(\bar{W}), c_{k-1})$$

$$\Omega_k = \{\bar{W} | E(\bar{W}) \leq c_k\} \quad (6)$$

$$u_k = \frac{\int_{\Omega_k} E(\bar{W}) d\bar{W}}{\int_{\Omega_k} d\bar{W}} \quad k=1, 2, \dots$$

令  $k \rightarrow \infty$ , 则有

$$\lim_{k \rightarrow \infty} c_k = c^*$$

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \Omega_k = \Omega^* \quad (7)$$

$$\lim_{k \rightarrow \infty} u_k = u^*(E(\bar{W}^*), c^*)$$

可以证明:

$$u^*(E(\bar{W}^*), c^*) = c^* \quad (8)$$

在上两式中,  $u^*$  就是  $E(\bar{W})$  在  $G$  上的总极小值,  $\Omega^*$  是其总极小点集,  $\bar{W}^*$  即为 BP 网络全局最优解。

具体计算时,  $u_k(E(\bar{W}), c_k)$  一般采用 Monte-Carlo 方法计算, 若采用 Monte-Carlo 求积的平均值法, 则表达式(5)可改写成:

$$u_k(E(\bar{W}), c_k) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N E(\bar{W}_i) \quad (9)$$

其中  $\bar{W}_i$  是第  $i$  次抽样时得到的在区域  $\Omega_k$  上均匀分布的随机向量,  $N$  为抽样次数, 为兼顾计算速度和精度,  $N$  可随着向总极值点的逼近而逐渐增大。

迭代开始时  $c_0$  的取值按如下方法确定: 将权向量  $\bar{W}$  中各分量的初始化随机小数, 代入公式(1)(4)中计算得到的  $E(\bar{W})$  值作为  $c_0$ 。

具体计算过程参见文献<sup>[4][5]</sup>等, 不再赘述。

至此, BP 网络全局最优的学习算法可归纳如下:

1. 根据问题的性质, 构造一个合适的 BP 网络结构。

2. 根据网络结构, 按(5)式形式构造系统误差度量函数  $E(\bar{W})$ 。

3. 用上述非线性函数总体极值求解方法求解  $E(\bar{W})$ , 得到网络权值的全局最优解  $\bar{W}^*$ 。

显然, 与传统的沿梯度下降算法相比, 不存在局部极小问题, 也不存在由于  $\eta, \alpha$  等参数选择不当而

导致的网络振荡甚至不能收敛等问题; 与模拟退火和遗传算法相比, 不存在大量需要经验式实验才能确定的问题, 且应用方便, 一旦形成误差函数  $E(\bar{W})$ , 即可由非线性函数总体极值求解程序实现计算机自动求解。

为了检验上述全局最优求解算法的有效性, 以在神经网络研究中的重要意义的异或(XOR)问题为例进行对比计算。

结果表明, 当需要处理的输入样本与训练集中的标准输入样本相差不大(10%以内)时, 全局最优解的计算结果精度高于梯度法计算结果的精度。但随着处理样本相对标准输入样本变形程度的增加, 全局最优解计算结果相对于相应标准输入样本期望输出值的误差急剧增大。这就说明, 在处理输入输出非线性映射关系等问题时, 全局最优解可望获得更精确的结果(因为全局最优解的计算结果对输入样本相对标准样本的变形程度较敏感)。但在处理分类问题时, 特别是在处理样本偏离标准样本较大的情况下, 采用全局最优解就不一定合适, 因为此时有可能得出完全相反的结论。

#### 参考文献

- [1] A. Torn and A. Zilinskas, Global Optimization, Lecture Notes in Computer Science, 1989
- [2] 葛人溥, 实用非线性最优化方法, 高等教育出版社, 1984
- [3] 阳明盛, 求解总极值问题的压缩变换法, ORSC'92文集, 成都科技大学出版社, 1992
- [4] 郑权等, 一个求总极值方法的构造和实现, 自然杂志, 1978, No1-2
- [5] 郑权等, 关于总极值问题的最优性条件, 高等学校计算数学, No. 3, 1981
- [6] 殷勤业等, 模式识别与神经网络, 机械工业出版社, 1992
- [7] 周继成, 人工神经网络, 科学普及出版社, 1993
- [8] L. C. W. Dixon & G. P. Szergo, Towards global optimization, 2nd, Amsterdam, North-Holland, 1978
- [9] 史忠植, 神经计算, 电子工业出版社, 1993