

神经网络主动学习的进化算法^{*})

An Evolutionary Algorithm for Active Learning of Neural Network

孙功星 戴贵亮

(中国科学院高能物理所计算中心 北京100039)

Abstract Most neural networks perform a passive learning procedure today, this means that neural networks have to receive and learn all candidate exemplars, in the case of greatly redundant exemplars, the training processes of neural networks are very time-consuming. An evolutionary active learning algorithm is presented for providing a solution to the problem mentioned above in the paper, it allows neural networks to evolutionarily select each time a subset of representative exemplars from which useful information is extracted and thus a useful piece of knowledge is accumulated until some needs are met. Unlike previous active learning strategies, its learning is focused on a subset of interesting exemplars (not an individual exemplar). Its distinct strength lies in using collective effect of a subset of exemplars resulted from evolutionary scheme, thus has some superiority over other algorithms. Simulation results for two tests indicate that our method can actively learn a concise set of exemplars representative of all available examples, in fact, this is performing a kind of data compression, so training is greatly of speedup.

Keywords Neural network, Evolution, Exemplar selection, Subset

1 引言

近年来,神经网络的研究取得了很大进展,特别是,为了克服传统的BP学习算法的缺陷,即学习速度慢和人为给定的拓扑结构对特定学习任务的不适应性,而发展的自适应神经网络的增长策略^[1],它通过不断地增长隐节点^[2,3]或子网^[4,5]来满足给定学习任务的复杂性要求。这种神经网络的增长算法不仅克服了人为指定的拓扑结构的困难,而且由于其结构过程所固有的模块化训练特性,也缓解了传统的BP算法训练速度慢的突出问题。由于神经网络训练程度很难把握,许多算法往往过分强调训练结果而牺牲泛化结果,致使网络的过拟合问题严重。为了克服过拟合问题,研究者采用了多网络合作模型^[6,7],由于多个网络的平均效应,可以避免单个网络的预言偏颇,获得满意的解。

但目前的神经网络的学习几乎都是被动过程,被动地接受并学习所有的候选样本,而不具有主动地挑选自己感兴趣的样本进行学习的能力,这样,在训练样本集大,且信息冗余严重时,被动学习的表现很不理想。由于人工神经网络是人脑模型的一种抽象,因而,也应该具有人类的学习的特征,即主动学习的特征。事实上,在许多领域中,如在计算学习理论中,主动学习算法已经受到广泛的注意。主动学习模型允许网络具有产生新样本或从可用的样本集中选择学习样本的能力,它大致可以分为两类:即询问式的学习^[8,9]和主动的样本选择^[10-12],运用它们解决函数逼近和模式分类问题时,都能获得较大的成功。但这些主动的学习算法往往只注重单个样本在当前环境中的作用,忽视样本的群体效应,导致学习效果不够理想。本文把达尔文的生物进化原理引入神经网络的主动学习过程,与以往的学习过程不同的是,利用进化原理,网络能够从候选样本集中进化出自己感兴趣的样本子集(而不是单个样本)进行学习,并从中获取有用的信息,逐步地积累知

识,直至完全地获取候选样本集所包含的知识为止。其优越性在于它注重群体效应,因而其表现更为理想。

2 主动学习策略

2.1 神经网络学习任务的描述

考虑两个变量 X 和 Y , 其中, $X \in X, X \subset R^r, X$ 为输入空间, $Y \in Y, Y \subset R^s, Y$ 为输出空间。具体地说,即 X 表示输入变量, Y 表示输出变量。为了简单起见,令 $s=1$ 。学习任务就是训练一个有 r 个输入神经元、一个输出神经元的网络,该网络能精确地反映输入变量和输出变量之间真实的映射关系。

按照随机变量 X 和 Y 的分布,在输入空间随机选取 n 个量 $x^n = (x_1, x_2, \dots, x_n)$, 和在输出空间取相应的 n 个目标量 $y^n = (y_1, y_2, \dots, y_n)$ 。令 $Z = (X^T, Y^T)^T, z_i = (x_i^T, y_i^T)^T$, 则 $z^n = (z_1, z_2, \dots, z_n)$ 表示训练集。

在本文的模拟实验中,输入量 x_i 的取值是完全可以控制的,我们定义“环境”概率函数 μ , 它描述不同的输入变量 x_i 的相对出现概率, $\mu: B(R^r) \rightarrow [0, 1]$, 其中, $B(R^r)$ 是由 R^r 的开集所产生的 Borel σ -代数。

当 x_i 和 y_i 完全精确可测,且 Y 和 X 之间存在确定的关系时,那么,对映射 $g: R^r \rightarrow R, x_i$ 和 y_i 之间就存在着一个精确的函数关系 $y_i = g(x_i)$, 或写作 $Y = g(X)$ 。这可看作是 X 和 Y 是随机情况的一个特例,即可理解为, X 和 Y 之间的关系是随机的,但在相同样本点的测量可以多次重复, Y 可视为多次测量的平均。此时, g 表示了一种平均关系, $g(X) = E(Y|X)$, 即为给定 X 时 Y 的条件希望值。

令 f 为神经网络的输出函数, w 是权空间 W 中的一个元素, $W \subset R^p$ (假定 W 是紧致的)。对某一特定的 x 和 w , 网络输出是 $f(x, w)$ 。通常用均方差来评估网络的表现。学习的目的就是寻求一组权重满足:

$$w^* \in \operatorname{argmin}_w \int (g(x) - f(x, w))^2 \mu(dx) \quad (1)$$

^{*}) 本项目为国家自然科学基金资助项目。孙功星 博士, 副研究员, 主要研究兴趣包括计算机群集计算、GRID 计算及 MSS、人工神经网络、信息处理等。戴贵亮 研究员, 博士生导师, 主要研究兴趣包括电子学读出系统、人工神经网络、计算机网络等。

2.2 主动学习的典型样本选择标准

一般情况下,样本的分布 μ 是未知的,但在样本数很大时,候选事例的分布与 μ 相近,因而,(1)式中的积分可改写成对所有事例的求和形式:

$$\hat{w}_n \in \operatorname{argmin}_w \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - f(x_i, w))^2 \quad (2)$$

对于上述的非线性二乘估计问题, \hat{w}_n 能在一定的条件下以随机的形式逼近最优权 w^* 。

为了使神经网络的主动学习更有效,这里选用均方差 (Mean Squared Error, MSE) 作为网络主动学习的典型样本标准,假设网络已经学习了 n 个子集所构成的样本集,这 n 个子集依次为 S_1, S_2, \dots, S_n , 它们所构成的训练集由 S^n 表示, $S^n = S_1 \cup S_2 \cup \dots \cup S_n$. 若现有的训练集所包含的信息不足以表示候选集的信息时,就需要选择下一个样本子集 S_{n+1} , 其应满足条件为:

$$S_{n+1} \in \operatorname{argmax}_{S_{n+1}} \operatorname{MSE}(S_{n+1} | S^n) \quad (3)$$

3 样本选择的进化方法

进化算法是从生物进化原理获得启发而提出的,在一个特定的环境中,个体的进化依赖于适者生存的理论,那些适应环境的个体将它们的优良基因 (gene) 遗传给其子代,而那些不适应环境的个体则逐渐地在进化过程中灭绝。进化算法是用简单的表示来编码复杂的结构,用简单的操作来改变这些结构,使其子代得以进化。本文中,个体的染色体 (chromosome) 是由一个位串来表示,串中的每一位为一个样本,称之为基因,一组染色体的集合称之为群体 (population)。遗传算法的操作包括繁殖、杂交和变异。在一特定的部分被训练的神经网络的情况下,主动学习的进化样本选择算法包括以下步骤:

1. **染色体编码。**相应于一个样本子集,染色体是一 k 位的串,用 S_i 表示,每一位为一个样本。形式上染色体的编码可表示为:

$$a_1 a_2 \dots a_k$$

其中, k 表示染色体的长度, a_j 为一随机选择的样本, $j=1, 2, \dots, k$ 。

2. **群体初始化。**选择一整数 M 作为群体规模参数,并设置进化的最大子代数 L , 令 $n=0$, 然后,从候选集中取得 M 个子集,每个子集有 k 个基因。这些子集构成了群体 $P(n) = \{S_n(1), S_n(2), \dots, S_n(M)\}$ 。

3. **计算适应值 (fitness)。**计算群体 $P(l)$ 中每个染色体 $S_i(l)$ 的原适应值 (raw fitness) $f(S_i(l))$

$$f(S_i(l)) = \sum_{x, y_i \in S_i(l)} (y_i - \hat{y}_i)^2$$

其中, y_i 为神经网络的理想输出值, \hat{y}_i 为网络的实际输出值。将它转变为比例适应值 (scaled fitness) $F(S_n(i))$

$$F(S_n(i)) = f(S_i(l)) - C_{\min}$$

其中, C_{\min} 是 $f(S_i(l))$ 中的最小者。

4. **父母选择策略。**对每一个体 $S_n(i)$, 计算其被选的概率

$$p_n(i) = \frac{F(S_n(i))}{\sum_{j=1}^M F(S_n(j))}$$

5. **繁殖。**利用选择策略,从群体 $P(l)$ 中选择进行繁殖的个体组成父代 $P(l+1)$ 代,然后对 $P(l+1)$ 代的基因进行重组。重组操作有杂交 (crossover) 和变异 (mutation)。本文中不涉及变异,故不作讨论。对于杂交,有一点杂交和两点杂交等。一点杂交操作如下:

$$\text{parent}_1 a_1 a_2 a_3 a_4 \rightarrow \text{offspring}_1 a_1 a_2 b_3 b_4$$

$$\text{parent}_2 b_1 b_2 b_3 b_4 \rightarrow \text{offspring}_2 b_1 b_2 a_3 a_4$$

6. **停止标准。**如 $l=L$ 或满足某指定的条件,则停止,否则,令 $l=l+1$ 转3。

4 神经网络主动学习的进化算法

假定有 N 个候选样本构成 z^N , 称之为样本的候选集。网络已经从候选集中选择了 n 个子集,并通过学习获得相关知识,倘若学习仍不充分,则按标准 $S_{n+1} = \operatorname{argmax}_S \operatorname{MSE}(S | S^n)$ 选择下一个样本子集,并加入到当前的训练样本集中,即 $S^{n+1} = S_{n+1} \cup S^n$, 继续学习。

但在这个过程中,必须考虑两个问题。其一是有关候选集的知识标准,即在主动学习过程中,神经网络认为自己已经获取了候选集的全部知识,应该结束学习过程的标准。我们指定 tol_N 作为整个候选样本均方差 mse_N 的理想精度,这里的 mse_N 为

$$mse_N = \frac{1}{N} \sum_{x_i \in z^N} (y_i - f(x_i, w_n))^2$$

当 $mse_N < tol_N$ 时,表明神经网络已经获得了有关候选集知识,这正是主动学习所要寻求的解,学习过程结束。其二是有关训练集的知识标准。在 $mse_N < tol_N$ 不能满足时,网络认为已经取得训练集的所有知识 (即获得充分训练) 的条件。我们指定 tol_n 作为训练样本集均方差 mse_n 的理想精度,此处, mse_n 为

$$mse_n = \frac{1}{n} \sum_{x_i \in S^n} (y_i - f(x_i, w_n))^2$$

即认为当 $mse_n < tol_n$ 时,网络获得了充分的训练。事实上,还有另外一种情况存在,就是进一步的训练无助于 mse_n 的减小,这种情况属于网络太小以致于不能适合给定的任务,本文中,假定给出的模型都是合适的,因此,这种情况不予考虑。基于遗传进化的神经网络的主动学习过程描述如下:

1. **神经网络的设计及权重初始化。**指定一神经网络的拓扑结构,并赋与其初始权重。令 $n=0, S^n = \phi$, 设置最大进化子代数 L 及规模参数 M 。

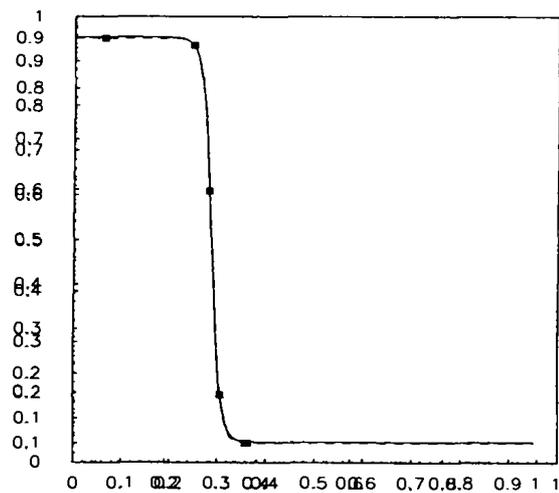


图1 主动学习网络选取的样本分布及其泛化结果

2. **选择最优子集。**从剩余的候选样本集中随机地抽取 M 个子集作为初始群体, $\{S_n(i), i=1, 2, \dots, M\}$, 其中 $S_n(i) \cap S_n(j) = \phi, i \neq j$, 用上节描述的遗传算法选取 S_{n+1} , 使 $S_{n+1} = \operatorname{argmax}_{S_n(i)} \operatorname{MSE}(S_n(i) | S^n)$ 。

3. 让 $S^{n+1} = S_{n+1} \cup S^n$ 作为训练集, 用基于模拟退火的共轭梯度算法训练神经网络直到满足条件 $mse_n < tol_n$ 为止。

4. 如 $mse_N < tol_N$, 退出。否则, 让 $n = n + 1$, 并从剩余的候选集中扣除 S_n 。转2。

5 实验及结论

本文提供两个实验来说明主动学习算法的有效性。为了使主动学习网络获得明显的利益, 假定候选的样本数远大于被选中的样本数。

实验一 用本文的主动学习网络拟合一个很短的S形函数。在 $[0, 1]$ 区间均匀地选取200个候选样本。最终主动学习网络进化地选择的样本分布及学习该样本集的神经网络的泛化结果见图1, 其中, 实线表示原始的曲线, 虚线表示神经网络的泛化结果。我们采用的网络结构是1-1-1, 即一个输入神经元, 一个隐含神经元和一个输出神经元。

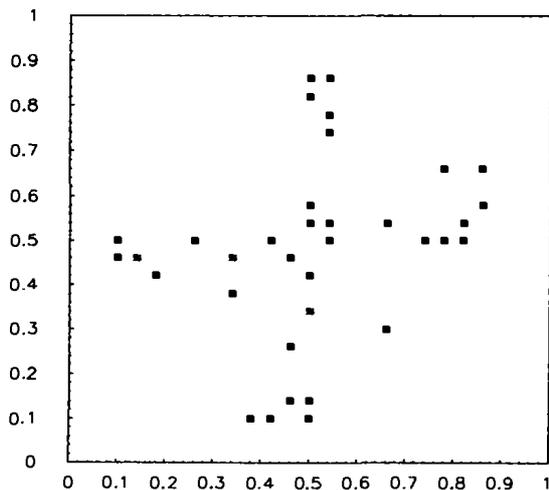


图2 主动学习网络选取样本的分布

实验二 逼近如下的函数

$$y = \begin{cases} 1, & (x_1 < 0.5, x_2 > 0.5) \text{ or } (x_1 > 0.5, x_2 < 0.5) \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$$

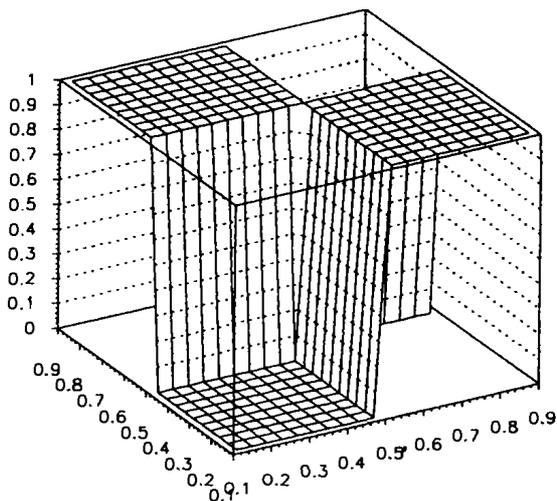


图3 主动学习网络的泛化结果

其中, $0.1 < x_1, x_2 < 0.9$ 。我们选择 20×20 个样本作为候选样本集, 所选的网络结构为2个输入节点、4个隐含节点和1个输出节点。结果网络从400个候选样本中主动选出的36个样本分布如图2。学习这36个样本的神经网络的泛化结果如图3。

从上面的实验结果可知: 本文基于进化的神经网络的主学习模型有以下特征:

1. 本算法总是选择具有代表性的样本进行学习。这些样本分布于梯度信息大的区域, 而在梯度信息小的区域(即平坦区域), 样本数极少。
2. 学习选择出来的样本与学习整个样本的网络具有几乎完全一样的泛化能力。
3. 由于有代表性的样本只占整个候选样本的很小一部分, 因此基于进化的神经网络的主动学习算法还可以节省训练时间。

本文描述了基于进化原则的神经网络主动学习算法, 它把生物的自然选择规则引入神经网络的主动学习过程, 这是一个合理的过程, 模拟实验的结果也证实了这个结论。

参考文献

- 1 孙功星, 朱科军, 戴长江, 等. 任务自适应神经网络结构研究. 核电子学与探测技术, 1999, 19(3): 164~168
- 2 Fahlman S E, Lebiere C. The cascade-correlation learning architecture. in Advances in Neural Information Processing Systems 2. D. S. Touretzky, Ed. San Mateo, CA: Morgan Kaufmann, 1990. 524~532
- 3 Hwang J, et al. Regression modeling in back-propagation and projection pursuit learning. IEEE Trans. Neural Networks, 1994, 5(5): 1~24
- 4 孙功星, 朱科军, 戴长江, 等. 层次式多子网级联神经网络. 电子学报, 1999, 27(8): 49~51
- 5 Smieja F. The pandemonium system of reflective agents. IEEE Trans. Neural Networks, 1996, 7(1): 97~106
- 6 孙功星, 戴贵亮. 改进 CAS 性能的多网络表决模型. 小型微型计算机系统, 2001, 22(2): 168~170
- 7 Ji Chuanyi, Ma Sheng. Combination of Weak Classifiers. IEEE Trans. Neural Networks, 1997, 8(1): 32~42
- 8 White H. Learning in artificial neural networks: A statistical perspective. Neural Computation. Cambridge, MA: MIT Press, 1989, 1(4): 425~464
- 9 Hwang J N, et al. Query-based learning applied to partially trained multilayer perceptron. IEEE Trans. Neural Networks, 1991, 2(1): 131~136
- 10 Plutowski M, White H. Selecting concise training sets from clean data. IEEE trans. Neural networks, 1993, 4(2): 305~318
- 11 Ahmad S, Omohundro S. A network for extracting the locations of point clusters using selective attention: [Tech. Rep. 90-110]. Int. Computer Science Institute, University of California, Berkely
- 12 Cachin C. Pedagogical pattern selection strategies. Neural Networks, 1994, 7(1): 175~181