

反馈型随机二元神经网络*

赵杰煜

(宁波大学信息科学与技术研究所, 宁波 315211)

摘要 提出并分析了一种全新的反馈型随机神经网络模型, 该模型不同于常见的 Boltzmann 机, 它不直接使用随机激活函数而是采用了随机型加权连接, 神经元为简单的非线性处理单元. 揭示了该网络模型存在惟一的收敛性平稳概率分布, 当网络中的神经元个数较多时, 平稳概率分布逼近于 Boltzmann-Gibbs 分布. 另外, 还讨论了该网络模型与 Markov 随机场之间的关系, 并提出了一种新型模拟退火和 Boltzmann 学习算法. 网络模型被成功地应用于解决难度较大的组合优化问题和人像的自动识别, 实验结果证实了该模型具有强大的计算能力和优异的泛化性能.

关键词 随机神经网络 反馈型随机二元神经网络 平稳概率分布 渐进式 Boltzmann 学习 Markov 随机场 模拟退火

众所周知, 在解决全局优化问题时, 确定型神经网络会陷入系统的局部极小而难以自拔, 通过引入随机波动, 系统就有能力摆脱局部极小, 从而收敛于全局极小点, 这种带有一定随机机制的神经网络便是随机型神经网络. 通常我们可以按照以下方法建立神经网络的随机机制: (1) 采用随机型神经元激活函数; (2) 采用随机型加权连接. 常见的 Boltzmann 机^[1,2]就是通过方法(1)获得的. 文中, 我们运用方法(2)建立随机型神经网络.

随机系统中的信息往往是模糊的、带噪声的, 有时系统的处理对象本身就不可避免地带有随机噪声, 因此随机型神经元的输入数据精度不必像确定型神经元所要求的那么高, 整个随机系统的数据表示精度是通过大规模并行分布式处理达到的, 这种完全分布式信息表达方式在容错性方面表现出强大的优势. 基于上述考虑, 我们采用了一种时间域信息表示法. 这种表示法已在传统的 Sigmoid 型神经网络模型中获得了成功应用, 如“位流表示法”^[3]、“脉冲流表示法”^[4]和“随机逻辑神经网络”^[5], 最近在 Spiking neurons^[6~8]方面的进展也引人注目. 时间域信息表示在硬件实现上具有非常高的效率.

本文提出了一种新的随机型全相联反馈神经网络模型, 该模型的神经元十分简单, 各神经元之间的加权连接为随机函数. 我们通过对模型的深入分析, 给出系统的平稳概率分布, 设计相应的模拟退火技术和学习算法, 并讨论该模型与 Markov 随机场之间的关系, 最后将其应用于复杂的组合优化和人像识别问题.

2000-09-18 收稿, 2001-01-18 收修改稿

* 国家自然科学基金(批准号: 69805002)和教育部优秀青年基金及浙江省自然科学基金青年人才培养专项基金资助项目

1 随机二进制神经元

二进制数据表示几乎垄断了整个计算机世界,理由十分简单:在通常情况下,二进制表示法是最有效和最经济的数据表示法^[9]. 二进制数据表示法不仅适于描述确定型数据,也可用于描述随机型数据,方法之一是采用随机二进制序列. 随机二进制序列中最为常见的是 Bernoulli 序列,其定义如下:

定义 1 Bernoulli 序列 S 是一个由 Bernoulli 随机变量 X 产生的二进制序列,随机变量 X 的概率密度函数如下:

$$f(x) = \begin{cases} p, & x = 0, \\ 1 - p, & x = 1, \\ 0, & \text{其他,} \end{cases}$$

其中 $0 \leq p \leq 1$, 我们称 S 为带概率 p 的 Bernoulli 序列.

Bernoulli 序列可以方便地用来表示一个模拟量,最直截了当的方法是将模拟量线性地映射到 Bernoulli 序列的概率 p 上. 给定一实数 r ($-1 \leq r \leq 1$), 我们可以采用概率为 $p = (r + 1)/2$ 的 Bernoulli 序列来表示,这种表示法称为“双相表示法”. 采用这种双相表示的实数的乘法极其简单,只需一个异或非(exclusive-nor)门即可实现¹⁾.

随机二进制神经元是一种十分简单的非线性处理单元,它的加权、输入和输出均采用随机二进制序列表示,神经元的操作是首先将所有输入与相应的加权相乘,然后将各加权输入相加,再根据总和与阈值的比较结果非线性地输出 1 或者 0. 由于双相表示法具有对称性,因此特别适合于反馈型神经网络. 本文仅讨论采用双相数据表示的随机二进制神经元.

定义 2 一个带 n 输入的 XNOR 型随机二进制神经元(XNOR-SBN)具有 n 个加权 $w_i \in [-1, 1]$ ($i = 1, 2, \dots, n$) 和 n 个输入 $v_i \in [0, 1]$ ($i = 1, 2, \dots, n$), 所有 w_i 和 v_i ($i = 1, 2, \dots, n$) 均采用双相 Bernoulli 序列表示,神经元的阈值 θ 是一个取值于 $[0, n]$ 之间的整型随机变量,其值根据概率密度函数 $\phi(\theta)$ 动态产生. 每个时钟周期神经元进行如下操作:

(i) 将 n 个输入 Bernoulli 序列的当前位分别与 n 个加权 Bernoulli 序列的当前位进行“异或非”操作(即进行乘法运算);

(ii) 将 n 个加权输入位相加,相加结果与当前动态产生的阈值相比较,如总和大于阈值,则输出 1; 小于阈值,则输出 0; 如总和正好等于阈值,则以 $1/2$ 的等概率随机取 0 或 1.

为了透彻地理解随机神经元的功能,我们必须对随机二进制神经元的激活函数进行深入分析,不妨用 $P_o(W, V, \phi(\theta))$ 来表示一个带 n 个输入的随机二进制神经元的激活函数,其中 $W = (w_1, \dots, w_n)$ 为神经元的权向量, $V = (v_1, \dots, v_n)$ 为相应的输入向量, $\phi(\theta)$ 为阈值概率密度函数. 文中我们亦称 $P_o(W, V, \phi(\theta))$ 为 XNOR-SBN 函数,该函数值就是神经元输出 1 的概率. 下面我们采用 MGF(moment generating function)来描述和分析 XNOR-SBN 函数.

如果用随机变量 X_i 来表示神经元的第 i 个加权输入,则 X_i 的概率密度函数如下:

1) Zhao J. Stochastic Bit Stream Neural Networks, PhD thesis. London: London University, 1995

$$f_i(x) = \begin{cases} (1 + w_i v_i)/2, & x = 1, \\ (1 - w_i v_i)/2, & x = 0, \\ 0, & \text{其他,} \end{cases}$$

其中 w_i 是对应的权值, v_i 为对应的输入值. 假设神经元的输入个数为 n , 各随机变量 X_i 相互独立, 则加权输入和 $X = \sum_{i=1}^n X_i$ 的 MGF 为

$$M_X(t) = \prod_{i=1}^n ((1 - w_i v_i)/2 + e^t(1 + w_i v_i)/2);$$

随机变量和的期望值为

$$\text{Exp}(X) = M'_X(0) = \sum_{i=1}^n (1 + w_i v_i)/2;$$

方差为

$$\begin{aligned} \text{Var}(X) &= \text{Exp}(X^2) - (\text{Exp}(X))^2 = M''_X(0) - M'_X(0)^2 \\ &= \left(\sum_{i=1}^n \frac{1 - w_i v_i}{2} + \sum_{i,j=1, i \neq j}^n \frac{1 - w_i v_i}{2} \frac{1 - w_j v_j}{2} \right) - \left(\sum_{i=1}^n \frac{1 - w_i v_i}{2} \right)^2 \\ &= \sum_{i=1}^n \frac{1 - w_i v_i}{2} - \sum_{i=1}^n \left(\frac{1 - w_i v_i}{2} \right)^2 = \sum_{i=1}^n \frac{1 - w_i^2 v_i^2}{4}. \end{aligned}$$

记 $M_X(t)$ 中 e^{it} 的系数为 $g_i(W, V)$, 则 XNOR-SBN 输出为 1 的概率为

$$\begin{aligned} P_o(W, V, \phi(\theta)) &= \sum_{\theta=0}^n \left(\sum_{i>\theta} g_i(W, V) \phi(\theta) + \frac{1}{2} g_\theta(W, V) \phi(\theta) \right) \\ &= \sum_{\theta=0}^n \left(\phi(\theta) \left(\frac{1}{2} g_\theta(W, V) + \sum_{i=\theta+1}^n g_i(W, V) \right) \right). \end{aligned}$$

以上是二进制神经元 XNOR-SBN 激活函数的精确概率描述, 由于采用了 MGF 表示, 激活函数 $P_o(W, V, \phi(\theta))$ 在形式上是间接给出的. 显而易见, 它与常见的 Sigmoid 型神经元激活函数有很大区别, 该激活函数不是总加权输入的简单函数. 然而, 当神经元的输入个数较多时, 二进制神经元的激活函数与 Sigmoid 型神经元激活函数就变得很相近, 以下定理给出了大输入数 XNOR-SBN 激活函数的极限值:

定理 1 对于任意一个具有较大输入个数 n 和确定型阈值 θ 的 XNOR-SBN 神经元 $B(W, V, \theta)$, $W = (w_1, w_2, \dots, w_n)$ 为权向量, $V = (v_1, v_2, \dots, v_n)$ 为输入向量, 如果 $\lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^n (1 - w_i^2 v_i^2) = +\infty$, 则 XNOR-SBN 激活函数可近似按下式计算

$$P_o(W, V, \theta) \approx \int_{\theta}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}} dx,$$

其中, $\sigma = \sqrt{\sum_{i=1}^n (1 - w_i^2 v_i^2)} / 2$, $\mu = \sum_{i=1}^n (1 + w_i v_i) / 2$.

定理的证明可以利用中心极限定理实现, 因为各加权输入的绝对值不大于 1, 当 $\lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^n (1 - w_i^2 v_i^2) = +\infty$ 时, Lindeberg 条件满足, 总加权输入随机变量渐近地服从正态分布, 由此得上

述结论¹⁾.

积分型 Gauss 函数与常见的 Sigmoid 函数 $\frac{1}{1+e^{-x}}$ 非常接近, 所以当神经元的输入个数较多时, 二进制神经元与随机 Sigmoid 型神经元就变得十分相近.

2 反馈型随机二元神经网络

2.1 定义

定义 3 反馈型随机二元神经网络(RSBN)是一个具备以下特征的图 $N(V, W, F)$, 该图具有大小为 n 的顶点集 V , 状态集 $S \in \{-1, +1\}^n$ 和边集 W , W 是一个大小为 $n \times n$ 的随机矩阵, 其元素 W_{ij} 是一个具有以下概率密度函数的随机变量:

$$f_{ij}(x) = \begin{cases} (1 + \beta w_{ij})/2, & x = 1, \\ (1 - \beta w_{ij})/2, & x = -1, \\ 0, & \text{其他,} \end{cases}$$

其中 $-1 \leq w_{ij} \leq +1$ 是随机连接 W_{ij} 的加权, $0 \leq \beta \leq 1$ 是一个控制参数. F 是神经网络的动态更新机制, 它随机地选择顶点并按下列规则更新其状态:

$$S_i = \text{sgn}\left(\sum_{j \neq i} W_{ij} S_j\right), \quad \sum_{j \neq i} W_{ij} S_j \neq 0.$$

假如加权和为 0, 则 S_i 以 $1/2$ 的概率随机地取 1 或 -1 . 如果顶点是串行地随机选择并更新状态的, 我们称之为“串行 RSBN”; 如果多个顶点被同时选中并更新其状态, 我们则称之为“并行 RSBN”.

注意此处神经元状态取值 1 或 -1 , 这纯粹是为了使系统具备对称性. 本文主要讨论串行 RSBN, 而且我们假定网络是对称的, 即所有 $W_{ij} = W_{ji}$.

2.2 平稳分布

统计物理和热力学的基本定律揭示, 当一个物理系统达到热平衡时, 系统的某一特定状态 α 发生的概率为 $P_\alpha = \frac{1}{Z} e^{-H_\alpha/k_B T}$, 其中 $Z = \sum_\alpha e^{-H_\alpha/k_B T}$, 其中 H_α 是 Hamilton 函数, T 为温度, k_B 为常数. 此概率分布就是众所周知的 Boltzmann-Gibbs 分布.

对于串行和少量并行 Boltzmann 机, 可以证明网络的稳定态服从 Boltzmann-Gibbs 分布^[2]. 现在我们来分析一下串行 RSBN 的平稳概率分布. 首先我们给出 RSBN 能量函数的定义

定义 4 反馈型随机二元网络(RSBN)的能量函数 $H = -\frac{1}{2} \beta \sum_{ij} w_{ij} S_i S_j$, 其中 β 是控制参数, w_{ij} 是神经元 i 和 j 之间随机连接的加权值, S_i 和 S_j 分别是神经元 i 和 j 的状态.

定理 2 当控制参数 $\beta \in [0, 1)$ 时, 串行反馈型随机二元网络 RSBN 存在惟一的平稳概率分布. 如果串行 RSBN 是对称的, 并且神经元个数较多时, RSBN 的平稳概率分布近似为 Boltzmann-Gibbs 分布.

证 证明可以应用随机过程的一些理论结果得到, 我们首先来证明 RSBN 存在惟一的平稳概率分布. 对于任一串行 RSBN, 不妨设系统状态 i 为 $\{S_1, S_2, \dots, S_k, \dots, S_n\}$, 状态 j 为

1) 见第 471 页脚注

$\{S_1, S_2, \dots, -S_k, \dots, S_n\}$, 那么状态转移概率

$$p_{ij} = \frac{1}{n} \left[\text{Prob} \left(\sum_{l=1, l \neq k}^n W_{kl} S_k S_l < 0 \right) + \frac{1}{2} \text{Prob} \left(\sum_{l=1, l \neq k}^n W_{kl} S_k S_l = 0 \right) \right], \quad p_{ii} = 1 - \sum_{j \neq i} p_{ij}.$$

如果控制参数 $\beta \in [0, 1)$, 则对网络中任意连接 w_{uv} 有 $-1 < \beta w_{uv} < 1$, 因此

$$p_{ij} \geq \frac{1}{2n} \text{Prob} \left(\sum_{l=1, l \neq k}^n W_{kl} S_k S_l = 0 \right) > 0.$$

在串行 RSBN 中, 每一个神经元都是被随机地选择并更新状态的, 对于任意两个系统状态, 都存在一定大小的概率, 使系统能在有限步内从一个状态变换到另一个状态. 所以说该 Markov 链是不可约的. 状态转移概率 p_{ij} 亦可改写如下:

$$\begin{aligned} p_{ij} &= \frac{1}{n} \left(1 - \text{Prob} \left(\sum_{l=1, l \neq k}^n W_{kl} S_k S_l > 0 \right) - \frac{1}{2} \text{Prob} \left(\sum_{l=1, l \neq k}^n W_{kl} S_k S_l = 0 \right) \right) \\ &\leq \frac{1}{n} \left(1 - \frac{1}{2} \text{Prob} \left(\sum_{l=1, l \neq k}^n W_{kl} S_k S_l = 0 \right) \right) < \frac{1}{n}, \end{aligned}$$

故

$$p_{ii} = 1 - \sum_{j \neq i} p_{ij} > 1 - \frac{1}{n}(n-1) = \frac{1}{n} > 0,$$

所以该 Markov 链是非周期性的. 不可约的且非周期性的 Markov 链存在惟一的平稳概率分布.

下面我们来证明当神经元个数较多时, 对称型串行 RSBN 的平稳概率分布近似为 Boltzmann-Gibbs 分布. 根据能量函数的定义, 状态 j 和状态 i 之间的能量差为 $H_j - H_i = 2 \sum_{l \neq k} \beta w_{kl} S_k S_l$, 而 $\sum_{l \neq k} \beta w_{kl} S_k S_l$ 正好是随机变量之和 $\sum_{l=1, l \neq k}^n W_{kl} S_k S_l$ 的期望值. 当神经元个数较多时, 由定理 1 得状态转移概率

$$\begin{aligned} p_{ij} &= \frac{1}{n} \left(\text{Prob} \left(\sum_{l=1, l \neq k}^n W_{kl} S_k S_l < 0 \right) + \frac{1}{2} \text{Prob} \left(\sum_{l=1, l \neq k}^n W_{kl} S_k S_l = 0 \right) \right) \\ &\approx \int_{-\infty}^{\mu/\sigma} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}} dx, \end{aligned}$$

其中 μ 和 σ 分别取值为

$$\begin{aligned} \mu &= \sum_{l \neq k} \beta w_{kl} S_k S_l = (H_j - H_i)/2, \\ \sigma &= \sqrt{\sum_{l=1, l \neq k}^n (1 - \beta^2 w_{kl}^2)}. \end{aligned}$$

注意此处 μ 和 σ 与定理 1 中的值不同, 这是因为神经元输出状态由 $\{0, 1\}$ 改为 $\{-1, 1\}$ 的缘故.

根据文献[10]的结论, Gauss 积分函数可用以下 Sigmoid 函数近似代替:

$$\begin{aligned} p_{ij} &\approx \frac{1}{1 + e^{-1.699\mu/\sigma}} \\ &= \frac{1}{1 + e^{-0.8495(H_j - H_i)/\sigma}}. \end{aligned}$$

同样, 我们也可得到

$$p_{ji} \approx \frac{1}{1 + e^{-0.8495(H_i - H_j)/\sigma}}.$$

如果我们选择 $q_i = e^{0.8495 H_i/\sigma}/Z$, $q_j = e^{0.8495 H_j/\sigma}/Z$, 其中 Z 是归一化系数, 那么 detailed balance 等式成立, 所以对称型串行 RSN 的平稳概率分布近似为 Boltzmann-Gibbs 分布.

利用上述结论, 我们只要通过适当地控制和调节参数 β 便可以有效地实现模拟退火过程.

2.3 模拟退火

随机神经网络中模拟退火过程实现如下: 首先将温度控制变量 T 设置到一个较高的温度值, 然后按一定的冷却程序逐步降低温度, 同时不断地任意选择网络中的一个单元, 按照概率

$p_{ij} = \frac{1}{1 + e^{(E_j - E_i)/T}}$ 更新该单元状态, 式中 E_i , E_j 是网络相应状态的能量. 如果温度下降是与周期数的 $\log$ 函数值成反比, 那么随着此过程的进行, 网络的能量将逐渐降到最低点^[2].

在反馈型随机二元网络 RSN 中, 模拟退火过程通过改变均方差 σ 实现, σ 的作用与温度控制变量 T 完全相同. 均方差 σ 越大, 网络的随机程度越大; 随着 σ 的逐渐下降, 网络的随机程度也逐渐下降; 当 σ 下降到 0 时, 随机型网络就退化为确定型网络. 为了实现 RSN 的模拟退火, 我们运用控制变量 β 来改变均方差 σ 的大小. β 的初始值设为 0, 此时均方差为 $\sigma = \sqrt{n-1}$, 达到其最大值, 网络变成一个完全随机系统. 然后, 我们按事先确定的冷却程序逐步将 β 从 0 增加到 1. 在此过程中, 网络的随机性渐渐下降, 能量逐渐降到其最低点.

利用模拟退火可以有效地解决组合优化问题, 只要将所要解决的问题的代价函数映射到网络的能量函数上, 模拟退火过程使能量降到最小, 相应的代价就降到最低, 由此得到组合优化问题的最优解. 确定型模拟退火近来也被成功地用于优化前向 BP 网络的学习^[10].

2.4 RSN 与 Markov 随机场

由于串行 RSN 的平稳概率分布逼近于 Boltzmann-Gibbs 分布, 我们因此可以将 RSN 与 Markov 随机场联系起来. 下面我们讨论 RSN 与 Markov 随机场之间的关系.

因为对应于串行 RSN 的 Markov 链是不可约并且是非周期性的, 所以存在惟一的平稳概率分布 $q = (q_1, q_2, \dots, q_m)$, 其中 m 是网络的总体状态个数. 根据随机过程的理论结果, 下列等式成立:

$$\sum_{j=1}^m q_j p_{ji} = q_i, \quad i = 1, 2, \dots, m,$$

其中 p_{ji} 是状态 j 至状态 i 的转移概率. 对于串行 RSN, 只有当状态 j 和状态 i 是相邻状态时 (即整个网络中只有一个神经元的状态发生改变), p_{ji} 才为非零. 假定网络总体状态 j 为 $\{S_1, S_2, S_3, \dots, S_k, \dots, S_n\}$, 而状态 i 为 $\{S_1, S_2, S_3, \dots, -S_k, \dots, S_n\}$, 则状态转移概率

$$p_{ji} = \frac{1}{n} \left(\text{Prob} \left(\sum_{l=1, l \neq k}^n W_{kl} S_k S_l < 0 \right) + \frac{1}{2} \text{Prob} \left(\sum_{l=1, l \neq k}^n W_{kl} S_k S_l = 0 \right) \right),$$

网络总体状态保持不变的概率为: $p_{jj} = 1 - \sum_{i \neq j} p_{ji}$.

由于状态总数 m 一般非常大, 要精确求解上述方程组是不太可能的. 然而, 我们已经证明了串行 RSN 的平稳概率分布逼近于 Boltzmann-Gibbs 分布. 因此, 在极限状态下, detailed

balance 等式成立的可能性极大. 在 detailed balance 等式成立的情况下, 即对任何 i 和 j 具有 $q_i p_{ij} = q_j p_{ji}$, 我们可以证明串行 RSBN 就是一个 Markov 随机场.

定理 3 如果 detailed balance 等式成立, 则串行 RSBN 是一个 Markov 随机场.

证 设网络中第 i 个顶点 v_i 的状态为 $S_i, i = 1, 2, \dots, n$, 条件概率

$$P(S_i | S_j; v_j \neq v_i) = \frac{P(S_1, S_2, \dots, S_n)}{P(S_1, \dots, S_i = 1, \dots, S_n) + P(S_1, \dots, S_i = -1, \dots, S_n)}$$

对 v_i 的任何一个不相邻顶点 v_u 有

$$\begin{aligned} & P(S_i | S_j; v_j \neq v_i, v_j \neq v_u) \\ &= (P(S_1, \dots, S_u = 1, \dots, S_n) + P(S_1, \dots, S_u = -1, \dots, S_n)) / \\ & (P(S_1, \dots, S_i = 1, \dots, S_u = 1, \dots, S_n) + P(S_1, \dots, S_i = 1, \dots, S_u = -1, \dots, S_n) \\ & + P(S_1, \dots, S_i = -1, \dots, S_u = 1, \dots, S_n) + P(S_1, \dots, S_i = -1, \dots, S_u = -1, \dots, S_n)). \end{aligned}$$

不妨用 a, b, c, d, e, f 分别表示网络状态 $(S_1, S_2, \dots, S_u = 1, \dots, S_n), (S_1, S_2, \dots, S_u = -1, \dots, S_n), (S_1, S_2, \dots, S_i = 1, \dots, S_u = 1, \dots, S_n), (S_1, S_2, \dots, S_i = -1, \dots, S_u = 1, \dots, S_n), (S_1, S_2, \dots, S_i = 1, \dots, S_u = -1, \dots, S_n), (S_1, S_2, \dots, S_i = -1, \dots, S_u = -1, \dots, S_n)$, 那么条件概率

$$P(S_i | S_j; v_j \neq v_i, v_j \neq v_u) = \frac{q_a + q_b}{q_c + q_d + q_e + q_f}.$$

如果 detailed balance 等式成立, 便有 $q_a p_{ab} = q_b p_{ba}, q_c p_{ce} = q_e p_{ec}, q_d p_{df} = q_f p_{fd}$.

因为 v_u 不是 v_i 的相邻顶点, 而 a, c, d 分别是 b, e, f 的相邻状态, 所以状态转移概率 $p_{ab} = p_{ce} = p_{df} = t_1 > 0; p_{ba} = p_{ec} = p_{fd} = t_2 > 0$. 由此可得

$$\frac{q_a + q_b}{q_c + q_d + q_e + q_f} = \frac{(1 + t_1/t_2) q_a}{(1 + t_1/t_2) q_c + (1 + t_1/t_2) q_d} = \frac{q_a}{q_c + q_d},$$

同样地可以得到

$$\frac{q_a + q_b}{q_c + q_d + q_e + q_f} = \frac{q_b}{q_e + q_f}.$$

因为神经元状态为二态, $(S_1, S_2, \dots, S_n)$ 不是 a 就是 b ; 同样地 $(S_1, S_2, \dots, S_i = 1, \dots, S_n)$ 不是 c 便是 $e, (S_1, S_2, \dots, S_i = -1, \dots, S_n)$ 不是 d 便是 f . 所以

$$P(S_i | S_j; v_j \neq v_i) = P(S_i | S_j; v_j \neq v_i, v_j \neq v_u).$$

由于 v_u 是任何一个与 v_i 不相邻的顶点, 所以条件概率 $P(S_i | S_j; v_j \neq v_i)$ 只与 v_i 的相邻顶点相关, 即 $P(S_i | S_j; v_j \neq v_i) = P(S_i | S_j; v_j \in Q(v_i)), Q(v_i)$ 是 v_i 的相邻顶点集合. 由此证明了串行 RSBN 是一个 Markov 随机场.

2.5 RSBN 与 Boltzmann 机

Boltzmann 机中的随机型 Sigmoid 神经元采用以下规则更新其状态:

$$\text{Prob}(S = 1) = \frac{1}{1 + e^{-(\sum_j w_{ij} v_j - \theta)/T}}, \quad \text{Prob}(S = 0) = 1 - \text{Prob}(S = 1) = \frac{1}{1 + e^{(\sum_j w_{ij} v_j - \theta)/T}}.$$

其中 S 为神经元状态, T 为温度控制变量. Boltzmann 机的随机性由温度控制变量 T 控制, 当

T 增大时,网络的随机程度增大; T 减小时,网络的随机程度减小. 当 $T = 0$ 时, Boltzmann 机退化为确定型双稳态神经网络. 温度控制变量在模拟退火过程中起着关键作用.

概括起来,RSBN 与 Boltzmann 机的主要相似之处如下:

- (i) 二者都为随机型神经网络,两种网络的神经元都具有 2 个离散状态;
- (ii) 两种神经网络的随机性均可通过控制变量控制;
- (iii) 神经网络的连接可以是兴奋型的,亦可是抑制型的,即连接加权可以为正,也可为负;
- (iv) 两种神经网络均有可调节的连接权值,权值的大小决定输入对神经元的影响程度;
- (v) 如果网络中神经元个数较多,连接权值又不是太大,则两种神经网络的功能十分相近.

除了上述相似之处外,RSBN 和 Boltzmann 机还存在明显的不同点:

- (i) RSBN 的随机性来自于它的连接, Boltzmann 机的随机性源于神经元激活函数;
- (ii) RSBN 的随机性大小由各神经元的 σ 值控制,而 Boltzmann 机的随机性由温度控制变量 T 调节;
- (iii) 在 RSBN 中,所有连接权值均在 $[-1, 1]$ 之间,而 Boltzmann 机的连接权值可以是无限大,如果 Boltzmann 机的连接权值被限制在一定范围内,那么其输出概率将无法逼近 1 或 0,从而影响网络学习能力.

3 RSBN 的学习算法

反馈型随机神经网络的学习就是通过调节网络的加权,使输入输出单元的状态服从特定的概率分布,也就是使网络内部的状态概率分布与外部环境的状态概率分布相吻合. 当一个随机神经网络的状态服从 Boltzmann-Gibbs 分布时,可以采用 Boltzmann 学习规则

$$\Delta w_{ij} = \epsilon (\langle S_i S_j \rangle_c - \langle S_i S_j \rangle_f),$$

式中 $\langle S_i S_j \rangle_c$ 是输入输出单元钳定时的 Hebb 学习项, $\langle S_i S_j \rangle_f$ 是系统自由运行时的 Hebb 学习项 (加上负号也称反 Hebb 学习项), ϵ 是学习速率.

上述学习需要在平衡态进行,这就要求进行模拟退火过程,所以学习过程相当耗时. 在此我们采用了第 2.3 节中提出的模拟退火法,学习算法是一种改进的“渐进式 Boltzmann 学习法”,学习过程简要如下:

- (i) 当有输入样本出现时,系统处于钳定态,即所有输入神经元的状态钳定于输入样本;当没有输入样本时,系统处于自由运行态,神经元的状态可以自由更新.
- (ii) 系统无论是处于钳定态还是处于自由运行态,都进行模拟退火过程. 先将控制参数 β 设为 0,此时网络变成一个完全随机系统,然后按事先确定的冷却程序逐步将 β 从 0 增加到 1. 在此过程中,网络渐渐达到其平衡态,能量降到最低点.
- (iii) 在处于钳定态时,如果两个神经元的状态相同,则将对应用于此两神经元的随机连接 w_{ij} 的加权加上一个小常数 ϵ ;如果两个神经元的状态不同,则将对应的随机连接 w_{ij} 的加权减去 ϵ .
- (iv) 在处于自由运行态时,如果两个神经元的状态相同,则将对应用于此两神经元的随机连接 w_{ij} 的加权减去一个小常数 ϵ ;如果两个神经元的状态不同,则将对应的随机连接 w_{ij} 的加

权加上 ϵ .

(V) 将系统轮流设置于钳定态和自由运行态,重复步骤(I)~(IV)直至输出单元的状态服从所要求的概率分布.

上述学习算法的工作原理可以通过状态空间的能量分布来解释,在处于钳定态时,单步学习使对应于输入样本的网络状态的能量下降,而此状态出现的概率由 Boltzmann-Gibbs 分布决定,即与能量负值的指数成正比,所以单步学习后该状态出现的概率会增加;自由运行态时,单步学习是一个去耦合过程,它使网络各状态间的耦合降低,从而增加网络的样本存储能力. 由于随机连接的加权值被限定在 $[-1, 1]$,信息在 RSBN 中的存储是完全并行和分布式的,这大大增强了系统的容错性和学习能力,渐进式 Boltzmann 学习又是区域性的,由此,RSBN 克服了 Boltzmann 机中常见的“过度学习”问题,“过度学习”就是随着学习的进行,网络的权值变得过大而使学习过程难以继续.

4 实验测试

4.1 图对分问题

对于任意一无向图 $G = (V, E)$,图对分问题(graph bisection problem)就是将图的顶点集 V 分成对等的两半 V_1 和 V_2 ,使连接该二部分顶点之间的边的个数为最小. 图对分问题属于 NP 完全问题,解决该问题有相当的难度.

为了用 RSBN 解决图对分问题,我们首先必须将此问题映射到神经网络中,具体方法如下:对无向图中的每一个顶点都赋予一个二进制神经元,如果该顶点属于 V_1 ,则将神经元状态设为 $+1$;如果该顶点属于 V_2 ,将神经元状态设为 -1 . 对于无向图中的任意两个顶点,如果它们之间有边相连,那么将神经网络中对应的加权设置为 1 ;如果它们之间没有边相连,将神经网络中对应的加权设置为 -1 ;神经元自身的连接加权 w_{ii} 全都设为 0 .

我们分别用 Boltzmann 机、MFA(mean field annealing)、反馈型随机二元网络 RSBN 对大小为 400 个顶点的无向图进行了测试和比较. 无向图中的所有连接边是以特定的概率随机产生的,任选图中的一半顶点记作集合 α ,对于图中任意一对顶点,如果这两个顶点均属于集合 α 或者两个顶点均不属于集合 α ,则以 P_α 的概率产生一条连接这对顶点的边;如果这两个顶点中只有一个属于集合 α ,则以 P_β 的概率产生一条连接这对顶点的边. 只要使 $P_\alpha > P_\beta$,用上述方法产生的无向图会存在较为理想的对分法. 实验结果如图 1 所示,显而易见,RSBN 的结果在三者之中是最佳的,Boltzmann 机次之,MFA 速度较快但结果不够理想. 由 RSBN 得到的图的两个对等部分间的边数比 Boltzmann 机得到的解还要少 23 条,而且速度大大超过 Boltzmann 机,该实验中的 P_α 和 P_β 分别取值 $2/5$ 和 $3/8$.

为了进一步比较 RSBN, Boltzmann 机和 MFA 对不同大小和不同连接的无向图的对分性能,我们选择不同的 P_α 和 P_β 值分别对 400 个顶点和 600 个顶点的无向图进行了测试,具体结果如表 1 所示. 表中的数据是系统第 200 周期时的能量值,可见,RSBN 仍然是三者之中性能最佳的.

4.2 人像自动识别

为了全面测试 RSBN 的学习性能和解决现实问题的能力,我们选择了难度很大的人像识别作为测试平台,传统的 Boltzmann 机学习速度太慢,根本无法解决这类问题. 人像图片取自

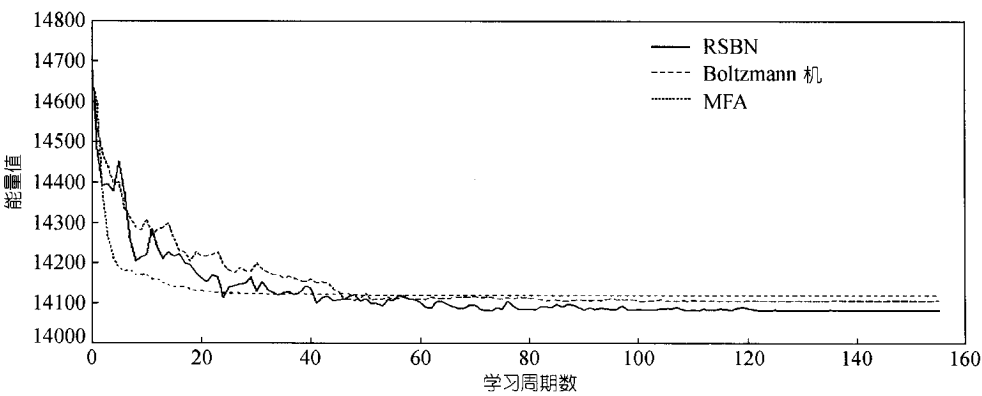


图 1 Boltzmann 机、MFA 和 RSNB 对大小为 400 个顶点的无向图进行对分的实验结果

于 MIT Media Lab 的 FERET 图片库,照片的大小为 128×192 像素、256 灰度,人像图片库中共有 200 幅照片,其中的 100 幅作为学习样本,另外 100 幅作为测试样本,测试样本是学习样本中人物的某些变化,如微笑、眨眼、位移、旋转、模糊、发型变化、光线变化和带眼镜等。一些典型的学习和测试样本如图 2 所示。

表 1 顶点数为 400 和 600 且具有不同的 P_α 和 P_β 值的无向图的对分实验结果

200 + 200 顶点					300 + 300 顶点				
P_α	P_β	RSNB	BM	MFA	P_α	P_β	RSNB	BM	MFA
0.20	0.15	5851.5	5917.5	5933.5	0.27	0.25	21023.5	21053.5	21076.0
0.30	0.25	9707.5	9727.0	9759.5	0.31	0.29	24598.5	24656.5	24674.0
0.34	0.32	11847.5	11865.0	11883.0	0.36	0.33	28520.5	28536.0	28527.0
0.40	0.38	14183.0	14187.5	14234.5	0.42	0.41	34726.0	34759.5	34824.5
0.50	0.45	17575.5	17590.5	17611.5	0.47	0.43	37793.0	37886.5	37960.5
0.60	0.35	14007.0	14007.0	14007.0	0.52	0.48	42270.0	42338.5	42386.0

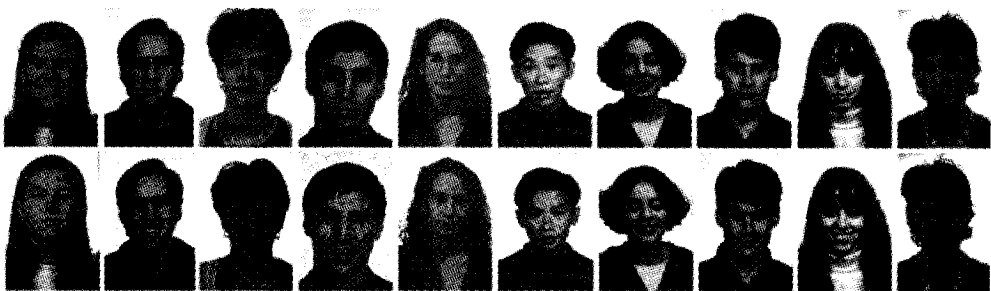


图 2 人像识别所用的学习样本(上行)和对应的测试样本(下行)

所用的 RSNB 网络是全相联反馈型结构,虽然前向型网络完全可以胜任静态人像的识别,但复杂的人物表情是动态变化的结果,只有反馈型网络才具备一定的动态记忆能力,反馈型网络比前向型网络具有更强的计算和存储能力,尤其是以后进一步的动态人像识别,更是非采用反馈型网络不可。用于人像识别的 RSNB 网络包含 3910 个神经元,其中的 $72 \times 54 = 3888$ 个神经元作为输入神经元,7 个作为输出神经元,15 个隐单元。因为在学习过程中所有输入单元总是被钳定于特定的输入样本,输入单元之间的连接不起作用,所以我们事先就去掉了所有输入

单元之间的连接以增加学习速度. 7 个输出单元可用于区分 $2^7 = 128$ 个不同的输出, 本实验中只用了 100 个不同的学习样本. 采用的学习算法是第 3 节介绍的“渐进式 Boltzmann 学习法”, 模拟退火过程由参数 β 控制. RSBN 的每个学习周期包括输入样本钳定学习和自由运行两种状态. 在自由运行状态, RSBN 随机地选择所有隐单元和输出单元.

所有人像图片样本在输入神经网络之前都经过预处理, 具体包括照片尺寸的规范化和灰度的规范化, 尺寸的规范化是将原照片按比例变换到 72×54 像素, 灰度的规范化是将照片中最暗的点变换到灰度 0, 最亮的点变换到灰度 255, 中间灰度的点按比例变换到 0 ~ 255 之间. 在将图片输入到 RSBN 网络时, 再把灰度 0 ~ 255 的点线性地映射至 $[-1, 1]$ 区间内. 经过 461 个学习周期后, RSBN 顺利地学完了全部 100 个学习样本, 对 100 个测试样本的识别率高达 92%.

5 结论

反馈型随机二元神经网络由十分简单的非线性处理单元通过超大规模并行连接而成, 不同于 Boltzmann 机, 其内部加权连接均为随机函数, 数据表示采用随机二进制序列形式, 乘法运算极其简便. 本文证明了反馈型随机二元神经网络存在惟一的收敛性平稳概率分布, 当神经元个数较多时, 网络的平稳概率分布逼近于 Boltzmann-Gibbs 分布. 文中还讨论了该模型与 Markov 随机场之间的关系, 提出了一种新颖的模拟退火算法和渐进 Boltzmann 学习算法. 反馈型随机二元神经网络的计算和存储能力与典型的随机 Sigmoid 型神经元网络相当, 但模拟退火和学习算法的速度大大优于后者, 使我们能够成功地将其应用于复杂的组合优化和人像自动识别问题. 反馈型随机二元神经网络的另一特点是其连接权值范围限定在 $[-1, 1]$ 之间, 由此造成了网络内部信息的完全分布式表达, 使系统具有极强的容错能力和优异的泛化性能.

参 考 文 献

- 1 Rumelhart D E, McClelland J L, the PDP Research Group. Parallel Distributed Processing. Cambridge: The MIT Press, 1986
- 2 Aarts E, Korst J. Simulated Annealing and Boltzmann Machines. New York: John Wiley & Sons, 1989
- 3 Shawe-Taylor J, Jeavons P, Daalen M. Probabilistic bit stream neural chip: theory. Connection Science, 1991, 3(3): 317 ~ 328
- 4 Murray A, Tarassenko L. Analogue Neural VLSI-A Pulse Stream Approach. Chapman & Hall, 1994
- 5 Kondo Y, Sawada Y. Functional abilities of a stochastic logic neural network. IEEE Trans on Neural Networks, 1992, 3: 434 ~ 443
- 6 Maass W. Computation with Spiking Neurons. The Handbook of Brain Theory and Neural Networks. 2nd ed. Cambridge: The MIT Press, 2001
- 7 Banerjee A. On the phase-space dynamics of systems of spiking neurons I: model and experiments. Neural Computation, 2001, 13: 161 ~ 193.
- 8 Banerjee A. On the phase-space dynamics of systems of spiking neurons II: formal analysis Neural Computation, 2001, 13: 195 ~ 225
- 9 Poppelbaum W J, Dollas A, Glickman J B, et al. Unary processing. Advances in Computers, 1987, 26: 47 ~ 92
- 10 Chuang C, Su S, Hsiao C. The annealing robust backpropagation learning algorithm. IEEE Trans on Neural Networks, 2000, 5: 1067 ~ 1077