

基于域理论的自适应谐振神经网络分类器^{*}

周志华 陈兆乾 陈世福

(南京大学计算机软件新技术国家重点实验室 南京 210093)

E-mail: chenzzq@netra.nju.edu.cn

摘要 提出了一种基于域理论的自适应谐振神经网络模型 FTART2 (field theory based adaptive resonance theory 2)。该模型结合了自适应谐振理论和域理论的优点,学习速度快,归纳能力强,效率高,可以根据输入样本自适应地调整拓扑结构,克服了前馈型网络需要人为设置隐层神经元的缺点。基准测试表明,FTART2 在学习精度和速度上都远远优于标准 BP 算法。

关键词 神经网络,机器学习,竞争学习,分类,自适应谐振理论,域理论。

中图法分类号 TP18

神经网络是一门交叉学科,作为对人类智能研究的重要组成部分,它已成为人工智能、认知科学、心理学、行为学等学科共同关心的焦点。80 年代以来,这一领域吸引了大批研究人员的注意,在神经网络的理论模型、学习算法、实际应用等方面进行了广泛而深入的探索,并取得了令人瞩目的成就,这充分证明了模仿生物神经计算功能的神经网络具有传统算法所难以比拟的许多优势,如自组织性、自适应性、联想能力和自学习能力等。

但是,日前的各种神经网络模型都存在一定的缺陷,如 BP 网络难以确定隐层神经元,训练时间长,容易陷入局部极小、不具备在线学习能力,联想存储网络容量小,所存储的信息会发生相互干扰和退化现象等等。因此,现阶段仍然需要对神经网络的理论和模型进行深入的研究。

本文在自适应谐振理论^[1]和域理论^[2]的基础上提出了 FTART2 (field theory based adaptive resonance theory 2) 模型。该模型学习速度快,归纳能力强,效率高,无需人为地设置隐层神经元,可以自适应地调整网络拓扑结构。基准测试表明,FTART2 是一种很好的神经网络分类器。

1 研究背景

1.1 自适应谐振理论

自适应谐振理论 (adaptive resonance theory, 简记为 ART)^[1] 是一类重要的竞争型神经网络学习模型,其记忆模式与生物记忆形式类似,记忆容量可以随学习模式的增加而增加,不仅可以进行实时在线学习,还可以在动态环境下学习,具有较好的性能。

典型的自适应谐振理论模型 ART1^[1] 如图 1 所示。图中的 F_1 和 F_2 分别表示属性表示层和类别表示层,它们保存了短期记忆 STM (short-term memory) 中的激活模式;在 F_1 与 F_2 之间的自底向上和自顶向下的路径中则保存了自适应长期记忆 LTM (long-term memory) 的内容。

对于任意序列的二值输入模式,ART1 都能稳定地进行学习,直到耗尽其存储能力为止。该模型通过改变从 F_1 到 F_2 的连接权来学习新的输入模式;通过从后者到前者的连接权传输的信号来体现系统的学习期望。ART1 通过自顶向下的学习期望对自底向上的信息施加注意力控制,从而防止了新学习的信息覆盖已学到的知识,并

* 本文研究得到国家自然科学基金 (No. 69875006) 和江苏省自然科学基金 (No. BK99036) 资助。作者周志华,1973 年生,博士生,主要研究领域为机器学习、神经网络、数据挖掘。陈兆乾,女,1940 年生,教授,博士生导师,主要研究领域为机器学习、知识工程、神经网络。陈世福,1938 年生,教授,博士生导师,主要研究领域为知识工程、机器学习、图像处理。

本文通讯联系人:周志华,南京 210093,南京大学计算机软件新技术国家重点实验室

本文 1999-01-11 收到原稿,1999-05-24 收到修改稿

且使得新信息可以不冲突地加入到已有的知识当中。

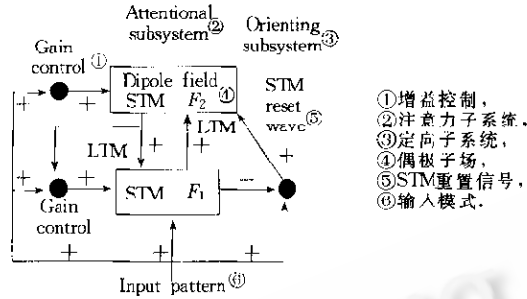


Fig.1 Typical adaptive resonance theory model ART1
图1 典型的自适应谐振理论模型 ART1

在此之后又出现了 ART2, ART3, ARTMAP, FuzzyARTMAP, FTART 等模型^[3],使自适应谐振理论发展成为一个重要的神经网络模型族。

1.2 域理论

域理论(field theory)得名于 Bachmann 等人提出的 CPM(coulomb potential model)模型^[2],但 Reilly 等人在此之前已进行了这方面的研究^[2],这些研究成果和 CPM 之后的同类算法目前都被称为域理论方法。

域理论是一种弛豫模型(relaxation model),其学习结果令一个能量函数极小化。这类算法将测试模式视为超空间中的一个正电荷,即测试电荷,然后用某种方法确定该电荷在由训练模式所产生的负电场中的运动,当测试电荷最终静止于某一能量极小点时,测试模式就获得与该点相同的分类。

域理论是目前唯一的一种只需进行一遍学习的神经网络模型,其学习速度极快,可以进行实时监督学习,而且记忆容量大,不会出现奇异现象^[2],是一种很好的异联想模式分类器。

2 FTART2 模型

2.1 拓扑结构

FTART2 网络由 4 层神经元组成,其拓扑结构如图 2 所示。

FTART2 的隐层神经元采用 Sigmoid 响应函数,输入层与第 2 层之间通过 Gaussian 连接权相连。该算法用第 2、第 3 层神经元对输入和输出分别进行分类,在这两层间建立联系以实现监督学习,可以形成对样本集的任意形状的划分。

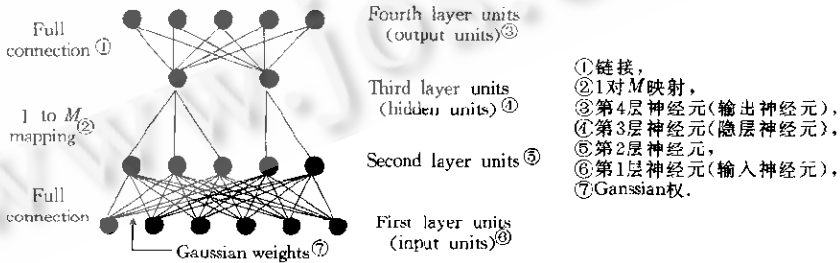


Fig.2 The architecture of FTART2
图2 FTART2网络拓扑结构

2.2 数学描述

FTART2 引入了域理论中的吸引域概念^[2],其第 1 层和第 2 层神经元之间的连接权采用钟型的 Gaussian 连接权。设第 1 层神经元接收到的输入模式为 $A_k = (a_1^k, a_2^k, \dots, a_n^k), k = 1, 2, \dots, m$, 则第 2 层神经元 j 的输入值为

$$\ln_{ij} = e^{-\left(\frac{a_j^k - \rho_{ij}^k}{\sigma_{ij}}\right)^2} \quad (1)$$

式(1)中, θ_{ij} 是输入层神经元 i 和第 2 层神经元 j 之间 Gaussian 连接权的响应中心值, α_{ij} 是连接权的响应特征宽度, 每个 Gaussian 连接权的响应中心值 θ_{ij} 和响应特征宽度 α_{ij} 在几何意义上唯一地确定了一个吸引域, bIn_{ij} 是神经元 j 接收的来自于神经元 i 的输入值, bIn_{ij} 与其他参数的关系满足式(2),

$$\begin{cases} a_i^k = \theta_{ij} \Rightarrow bIn_{ij} = 1 \\ a_i^k \neq \theta_{ij} \Rightarrow bIn_{ij} \rightarrow 0 \end{cases} \quad (2)$$

第 2 层神经元 j 根据下面的式(3)计算其输出值 b_j , 其中 θ_j 是 j 的阈值, f 是式(4)所示的 Sigmoid 函数,

$$b_j = f\left(\sum_{i=1}^n bIn_{ij} - \theta_j\right), \quad (3)$$

$$f(u) = \frac{1}{1 + e^{-u}}. \quad (4)$$

所有第 2 层神经元之间进行泄漏竞争(允许同时存在多个胜者的竞争称为泄漏竞争), 第 3 层神经元 h 根据下面的式(5)计算其输出值 c_h , 其中 j 在第 2 层神经元竞争中获胜, 且 j 与 h 之间存在着连接, θ_h 是 h 的阈值, f 是 Sigmoid 函数,

$$c_h = f\left(\sum_j b_j - \theta_h\right). \quad (5)$$

在网络的训练过程中, 当输入模式位于由 Gaussian 连接权的 θ_{ij} 和 α_{ij} 所确定的吸引域中时, θ_{ij} 和 α_{ij} 不作任何改变, 否则, 将根据输入模式与原吸引域的位置关系调整吸引域, 使输入模式成为该吸引域的典型吸引子. 如式(6)和式(7)所示,

$$\theta'_{ij} = \begin{cases} \frac{\theta_{ij} + 0.3\alpha_{ij} + a_i^k}{2}, & a_i^k \in (-\infty, \theta_{ij} - 0.3\alpha_{ij}) \\ \theta_{ij}, & a_i^k \in [\theta_{ij} - 0.3\alpha_{ij}, \theta_{ij} + 0.3\alpha_{ij}] \\ \frac{\theta_{ij} - 0.3\alpha_{ij} + a_i^k}{2}, & a_i^k \in (\theta_{ij} + 0.3\alpha_{ij}, +\infty) \end{cases} \quad (6)$$

$$d'_{ij} = \begin{cases} \frac{3\alpha_{ij} - (10a_i^k - 10\theta_{ij})}{6}, & a_i^k \in (-\infty, \theta_{ij} - 0.3\alpha_{ij}) \\ \alpha_{ij}, & a_i^k \in [\theta_{ij} - 0.3\alpha_{ij}, \theta_{ij} + 0.3\alpha_{ij}] \\ \frac{3\alpha_{ij} + 10a_i^k - 10\theta_{ij}}{6}, & a_i^k \in (\theta_{ij} + 0.3\alpha_{ij}, +\infty) \end{cases} \quad (7)$$

当某一已存在的吸引域相对于其典型吸引子有所偏离时, 该吸引域将按式(8)向典型吸引子移动. 其中 δ 为 Gaussian 连接权响应中心值的调整步长,

$$\theta'_{ij} = \theta_{ij} + \delta(a_i^k - \theta_{ij}), \quad 0 < \delta < 1. \quad (8)$$

与传统的前馈型算法 BP 不同, FTART2 具有自适应谐振理论动态增加神经元的特性, 其隐层神经元无需事先设定, 在学习新的样本时, 算法会根据需要在隐层适当增加神经元, 将其与部分已有神经元相连, 并且适当地调整连接权, 即可覆盖新增模式. 此外, BP 网络采用超立方体对示例空间进行划分, 当示例空间未被训练样本完全覆盖时, 学习的结果是对空洞进行简单的归并, 这导致误差修正型算法需要循环迭代学习, FTART2 吸取了域理论的优点, 采用超椭球体对样本空间进行划分, 其 Gaussian 连接权响应中心值对应于经学习后样本分量的特征值. 这样, 经过第 1 层神经元即可对样本空间进行比较复杂的划分, 采用这样的结构使算法只需一遍训练, 学习速度快于 BP. 同时, 由于超椭球体比超立方体具有更好的填充性能, 因此, FTART2 的分类精度也要高于 BP.

我们在 FTART2 之前提出的 FTART 算法没有将分类任务与函数近似任务进行区分, 其训练过程是离散性的, 当使用连续判别方式时, 连接权的调整不可避免地会具有盲目性. 而 FTART2 是一个专门针对分类任务设计的神经网络分类器, 不仅训练、判别过程都是离散性的, 而且其输入、输出神经元的设置、第 2 层神经元进行的函数映射以及输出层所进行的“胜者为王”式的竞争都有利于分类任务的完成. 更重要的是, 在 FTART 中, 两个隐层的神经元必须同时增加, 这就加大了网络的复杂度; 而 FTART2 对两个隐层的功能进行了明确的分工, 即第 2 层代表样本的输入内部表示, 第 3 层代表输出内部表示, 仅当输入、输出内部表示都不正确时, 两个隐层

才同时增加神经元,这就使得网络的自适应能力比 FTART 更强.此外,在 Gaussian 连接权响应中心值和响应特征宽度的设置及调整上,FTART2 都采用了与 FTART 不同的机制,这也使得网络分类精度得到了提高.

2.3 学习算法

FTART2 学习算法.

- (1) 根据问题的输入、输出分量数形成初始的网络;
- (2) 将输入模式 A_k 送到输入层神经元;
- (3) 输入层神经元根据式(1)通过 Gaussian 连接权将输入值送到第 2 层神经元;
- (4) 第 2 层神经元根据式(3)计算输出值;
- (5) 所有第 2 层神经元之间进行泄漏竞争,获胜的神经元将其输出值送到与之相连的第 3 层神经元,并根据式(5)计算第 3 层神经元的输出值;
- (6) 所有第 3 层神经元之间进行“胜者为王”式的竞争,获胜的神经元将其输出值通过连接权传送到第 4 层神经元,如果网络处于训练之中,则执行步骤(8);
- (7) 所有第 4 层神经元之间进行“胜者为王”式的竞争,获胜神经元代表的分类被激活,其他分类被抑制,执行步骤(15);
- (8) 计算第 4 层神经元实际输出与希望输出之间的误差,若误差超出允许范围,则执行步骤(10);
- (9) 获胜的第 4 层神经元产生鼓励信号,逐级反馈到正确分类中输出值最大的第 2 层神经元,然后根据式(6)和式(7)调整 Gaussian 连接权的响应中心值和响应特征宽度,使它们更“接近”于当前的输入模式,执行步骤(15);
- (10) 用希望输出与所有第 3 层神经元的特征输出进行比较,寻找误差最小的第 3 层神经元,若该神经元的特征输出和希望输出的误差超出允许范围,则执行步骤(14);
- (11) 寻找与该第 3 层神经元相连的输出值最大的第 2 层神经元,若该第 2 层神经元没有在竞争中获胜,则执行步骤(13);
- (12) 第 3 层神经元回传鼓励信号,送入输出值最大的第 2 层神经元,然后根据式(8)调整 Gaussian 连接权的响应中心值,直到相应的第 3 层神经元能够在竞争中获胜,执行步骤(15);
- (13) 在网络的第 2 层增加一个新的神经元,该神经元与步骤(10)中找到的第 3 层神经元相连.同时,新神经元与输入层所有神经元都进行连接,其连接权的响应中心值为输入神经元的当前输入值,响应特征宽度为预设的默认值,执行步骤(15);
- (14) 在网络的第 2 层和第 3 层各添加一个新的神经元,新的第 2 层神经元与输入层所有神经元都进行连接,其连接权的响应中心值为输入神经元的当前输入值,响应特征宽度为预设的默认值,新的第 3 层神经元与新的第 2 层神经元相连.同时,新的第 3 层神经元还和输出层的所有神经元都进行连接,其连接权根据当前的希望输出加以确定;
- (15) 结束.

3 基准测试

3.1 Circle-In-The-Square

Circle-In-The-Square 是 DARPA (defense advanced research projects agency) 的 ANNT 计划 (artificial neural network technology program) 所采用的评价神经网络系统性能的基准测试问题,其具体描述见文献[4].

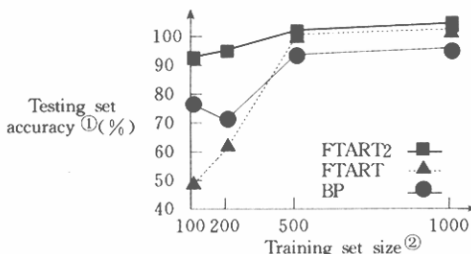
我们对 FTART2, FTART 与标准 BP 算法^[5]进行了测试 (Pentium MMX 200, 32MB RAM), 测试结果见表 1. FTART2 所用的参数设置为 $\alpha_j = 0.3$, $\theta_j = 0.3$, $\theta_k = 0.3$, $\delta = 0.1$, 第 2 层神经元泄漏竞争获胜下限为 0.8, 实际输出与希望输出间的最大允许误差为 0.11. 为了控制实验时间,我们限定 BP 只进行 200 次迭代. 由于 BP 算法隐层神经元数难以确定,因此,每次实验我们都用 3 个 BP 网络进行学习,其隐层神经元数分别为 5, 15 和 25, 表 1 中 BP 网络的数据是它们的平均值.

Table 1 Comparison of Circle-In-The-Square testing results
表 1 Circle-In-The-Square 测试结果比较

Algorithm ^①	Training set size ^②	Training set accuracy ^③ (%)	Testing set accuracy ^④ (%)	Training time (sec.) ^⑤
FTART2	100	100	92.0	248
	200	100	94.0	572
	500	100	99.2	1 431
	1 000	100	99.6	2 702
FTART	100	100	49.8	381
	200	100	62.3	924
	500	100	98.9	2 012
	1 000	100	99.1	3 976
BP	100	80.3	76.3	2 224
	200	72.0	71.3	4 769
	500	93.5	93.5	11 273
	1 000	96.1	95.0	22 353

①算法,②训练集规模,③训练集精度,④测试集精度,⑤训练时间(秒).

由表 1 可以看出,FTART2 算法和 FTART 算法的训练集的精度都为 100%,显著地优于 BP 算法.在测试集精度上,当训练样本较少时,BP 算法优于 FTART 算法,样本较多时,FTART 算法优于 BP 算法,但 FTART2 算法始终稳定地优于前两者.值得注意的是,即使我们限定 BP 算法只进行 200 次迭代,其训练时间仍然约为 FTART 算法的 5 倍和 FTART2 算法的 10 倍.显然,在该基准测试中,FTART2 算法的学习精度、归纳能力和效率最好,FTART 算法其次.图 3 直观地显示出了比较结果.



①测试集精度,②训练集规模.

Fig. 3 Comparison of Circle-In-The-Square testing results
 图 3 Circle-In-The-Square 测试结果比较

FTART2 在使用 100 个和 1 000 个训练样本时得到的测试结果如图 4 和图 5 所示.其中黑色表示网络认为该点在圆形区域中;白色表示网络认为该点在圆形区域外.

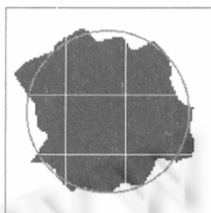


Fig. 4 The testing result of FTART2 when 100 training examples are fed
 (The classification accuracy is 92%)

图 4 100 个训练样本时 FTART2 的测试结果
 (分类精度为 92%)

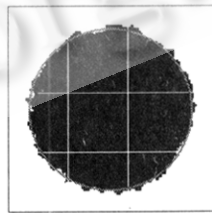


Fig. 5 The testing result of FTART2 when 1 000 training examples are fed
 (The classification accuracy is 99%)

图 5 1 000 个训练样本时 FTART2 的测试结果
 (分类精度为 99%)

3.2 分辨两个螺旋形

分辨两个螺旋形是由 Wieland 提出的神经网络基准测试问题,其具体描述见文献[6].

FTART2, FTART 和标准 BP 算法的测试结果如表 2 所示(Pentium MMX 200, 32MB RAM). FTART2 所用的参数设置与上节相同,仍然限定 BP 算法只进行 200 次迭代,并且所使用的隐层神经元数分别为 5, 15 和 25 的 3 个 BP 网络进行学习,表 2 中 BP 网络的数据是它们的平均值.

由表 2 可以看出,FTART 和 FTART2 算法的训练集、测试集精度都为 100%,远高于 BP 算法,但 FTART2 算法的训练时间开销更小.显然,FTART2 比 FTART 和 BP 算法具有更强的学习能力.图 6 和图 7 分别显示出

了 FTART2 和 BP 算法的测试结果。

Table 2 Comparison of Tell-Two-Spirals-Apart testing results

表 2 分辨两个螺旋形测试结果比较

Algorithm ^①	Training set accuracy ^② (%)	Testing set accuracy ^③ (%)	Training time (sec.) ^④
FTART2	100	100	523
FTART	100	100	1 024
BP	52.0	51.3	4 413

①算法, ②训练集精度, ③测试集精度, ④训练时间(秒)。



Fig. 6 The testing result of FTART2
(The classification accuracy is 100%)

图 6 FTART2 的测试结果(分类精度为 100%)



Fig. 7 The testing result of BP
(The classification accuracy is 52%)

图 7 BP 的测试结果(分类精度为 52%)

4 结束语

本文提出了一种基于域理论的自适应谐振神经网络模型 FTART2, 该模型结合了二者的优点, 学习速度快, 归纳能力强, 效率高, 还可以根据训练样本自适应地生成隐层神经元, 克服了传统前馈型神经网络难以设置隐层神经元的缺陷。基准测试表明, FTART2 在学习精度和速度上都优于目前流行的 BP 算法, 是一种较好的神经网络分类器。

参考文献

- 1 Carpenter G A, Grossberg S. The ART of adaptive pattern recognition by a self organizing neural network. *Computer*, 1968, 21(5): 77~88
- 2 Wasserman P D. *Advanced Methods in Neural Computing*. New York: Van Nostrand Reinhold, 1993
- 3 Zhou Zhi-hua, Chen Zhao-qian, Chen Shi-fu. Review of adaptive resonance theory. *Computer Science*, 1999, 26(4): 54~56 (周志华, 陈兆乾, 陈世福. 自适应谐振理论综述. *计算机科学*, 1999, 26(4): 54~56)
- 4 Carpenter G, Grossberg S, Markuzon N *et al.* Fuzzy ARTMAP: a neural network architecture for incremental supervised learning of analog multidimensional maps. *IEEE Transactions on Neural Networks*, 1992, 3(5): 698~713
- 5 Rumelhart D, Hinton G, Williams R. Learning representations by backpropagating errors. *Nature*, 1986, 323(9): 318~362
- 6 Lang K J, Witbrock M J. Learning to tell two spirals apart. In: Touretzky D, Hinton G, Sejnowski T eds. *Proceedings of the 1988 Connectionist Models Summer School*. San Mateo, CA: Morgan Kaufmann Publishers, Inc., 1989. 52~59

Field Theory Based Adaptive Resonance Neural Network Classifier

ZHOU Zhi-hua CHEN Zhao-qian CHEN Shi-fu

(State Key Laboratory for Novel Software Technology Nanjing University Nanjing 210093)

Abstract A field theory based adaptive resonance neural network model, FTART2, is proposed in this paper. FTART2 combines the advantages of the adaptive resonance theory and the field theory, and achieves fast learning, strong generality and high efficiency. Moreover, FTART2 can adaptively adjust its network topology so that the disadvantage of manually configuring hidden neurons of traditional feed-forward networks is avoided. Benchmark tests show that FTART2 achieves higher accuracy and faster speed than standard BP.

Key words Neural network, machine learning, competitive learning, classification, adaptive resonance theory, field theory.