第 5 卷(A 版) 第 1 期
2000 年 1 月

中国图象图形学报
Journal of Image and Graphics

Vol. 5(A), No. 1
Jan. 2000

一种基于正交神经网络的曲线重建方法

肖少拥[1),2)] 金小刚[1)] 石文俊[2)]
[1)](浙江大学 CAD & CG 国家重点实验室, 杭州 310027)
[2)](浙江大学计算中心, 杭州 310027)

摘　要　提出了一种基于正交神经网络的曲线重建方法. 该正交神经网络结构与三层前向网络相同, 不同的是正交网的隐单元处理函数采用 Tchebycheff 正交函数, 而不是 sigmoidial 函数. 新的曲线重建方法具有利用较少的数据点列将光滑的曲线以较高的精度重建的特点. 网络训练采用 Givens 正交学习算法, 由于它不是一种迭代算法, 故学习速度快, 而且没有网络初始参数的选取问题, 网络训练又能避免陷入局部极小解等问题. 实验表明, 用正交神经网络方法重建的曲线在样本点和非样本点处均具有很高的逼近精度.

关键词　曲线重建　正交神经网络　Givens 学习算法

中图分类号: TP391.41　**文献标识码**: A　**文章编号**: 1006-8961(2000)01-0062-04

Curve Reconstruction Based on Orthogonal Neural Network

XIAO Shao-yong[1),2)], JIN Xiao-gang[1)], SHI Wen-jun[2)]
[1)](*State Key Lab of CAD & CG, Zhejiang University, Hangzhou* 310027)
[2)](*Computer Center, Zhejiang University, Hangzhou* 310027)

Abstract　This paper presents a new curve reconstruction method based on orthogonal neural network. The orthogonal neural network's structure is the same as that of the three layered feedforward neural network. The difference is that the processing function of hidden unit of the orthogonal neural network is Tchebycheff orthogonal function instead of sigmoidial function and the calculation of Tchebycheff function is simpler than that of sigmoidial function. The new method uses less samples and reconstructs higher precision smooth curves than previous methods. By adopting a non-iterative Givens learning algorithm, the new network learning algorithm learns fast and can avoid false local minima and the initialization of weights and other parameters. Experiments show that the reconstructed curve using the orthogonal neural network method has high precision not only at learning sample points but also at the non-learning sample points.

Keywords　Curve reconstruction, Orthogonal neural network, Givens learning algorithm

0　引　言

离散点列(x_i, y_i), $i = 1, 2, \cdots, m$ 所代表的复杂曲线的重建, 是计算几何与图形学研究的一个重要问题, 其实质是函数拟合逼近问题, 应用神经网络方法来解决是一种新的尝试. 利用网络神经元对样本点进行训练, 进而模拟输入输出数据的内部关系, 通过不求出实际问题的数学参数方程(有些问题也无法求出), 仅根据有限个样本点的信息, 就可获得其它输入点的信息. 这样的方法在数据受到破坏(噪音影响)或不完整时显得尤其重要. 但采用传统的神经网络学习算法如 BP 算法[1]进行网络训练时存在以下问题:

(1) BP 算法是一个非线性优化算法, 不可避免

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(69603005); 浙江省自然科学基金资助项目(698022)
收稿日期: 1999-05-07; **收到修改稿日期**: 1999-10-13

地存在局部极小问题;

(2) 网络初始权值和参数(如学习率)的选取对网络的训练有较大影响, 如何选取缺乏理论指导;

(3) 传统的 BP 学习算法的收敛速度很慢, 通常要迭代几千次甚至更多.

由于 BP 算法的上述局限性, 人们探索对其进行改进[2,3]. Grzeszczuk[4] 提出一个神经动画模型, 就是采用改进的 BP 算法对网络进行快速学习. 这些改进工作只是针对 BP 算法的某一局限性, 而且网络的推广能力即在非样本点处的逼近效果如何也值得探讨. Yang[5] 则提出无隐层的正交网络模型, 采用基于 Legendre 正交多项式基的网络训练算法.

由于三层前向神经网络具有逼近任意连续函数的特点[6], 肖丹[7] 提出正交投影神经网络模型, 其学习算法不是迭代过程, 具有学习速度快的特点, 但要求给定的初始权值, 使得在输出神经元的输入端得到的矢量 $\boldsymbol{V}_1, \boldsymbol{V}_2, \cdots, \boldsymbol{V}_p$ 是线性无关的. 若它们线性相关, 则文献[7] 中的算法无法进行学习, 故输入层到隐层的权值要选取恰当, 但该文没有给出选取原则.

本文提出具有单隐层的三层正交神经网络模型用于曲线重建, 采用 Givens 正交变换[8] 对隐层到输出层的权值进行学习, 不存在网络初始权值的选取问题. 网络隐层神经元的非线性处理函数取 Tchebycheff 正交多项式函数[9], 不同的隐节点具有不同的非线性函数 $T_n(x)$. 由于 $T_n(x)$ 之间存在递推关系, 不会增加网络的计算量和复杂性. 网络输入层到隐层是线性连接, 且连接权均为 1, 阈值为 0, 这样输入层到隐层的权值不需学习, 网络训练更为简单.

正交网络隐层到输出层的权值的学习算法不同于 Yang[5] 基于梯度下降的学习算法, 本文提出采用 Givens 正交算法进行求解, 可快速获得网络的权值, 它等价于梯度下降的迭代收敛过程[10], 但可避免学习收敛过程较长和可能陷入局部极小值的问题, 具有学习速度快和获得全局最优解的特点, 可以很好地克服 BP 算法的上述局限性.

1　正交神经网络模型

神经网络结构如图 1 所示. 网络的输入层含 1 个神经元, 用 x 表示输入矢量, x_i 表示第 i 个学习样本点; 隐层含 n 个神经元; 输出层含 1 个神经元, y 表示网络的输出. 输入层与隐层的连接权为 1, 阈值为 0; w_j 表示隐层第 j 个神经元与输出层神经元的连接权, 其阈值为 0. 网络中的非线性函数取 Tchebycheff 正交多项式函数 $T_n(x)$, 它具有以下的递推关系[9] (如图 1 所示):

$$\begin{aligned} &T_1(x) = 1, \\ &T_2(x) = x, \\ &\vdots \\ &T_n(x) = 2xT_{n-1}(x) - T_{n-2}(x), \quad n = 2, 3, \cdots \end{aligned} \tag{1}$$

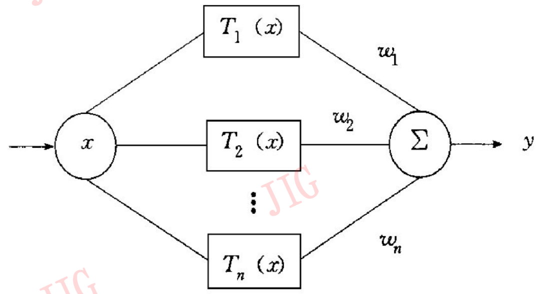

图1　正交神经网络模型

设 (x_i, y_i), $i = 1, 2, \cdots, m$ 为 m 个学习样本. 针对输入矢量 x_i, 网络的实际输出为 y_i, 希望输出为 y_{oi}, 则有:

$$y_i = \sum_{k=1}^{n} w_k T_k(x_i) \tag{2}$$

定义网络的能量函数为:

$$E = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}(y_i - y_{oi})^2 \tag{3}$$

2　曲线重建的网络学习算法

根据学习样本获得网络的权值 $w_i (i = 1, 2, \cdots, n)$, 即得到用于曲线重建的正交神经网络模型, 给出一系列 x 值, 通过网络获得 y 值, 即实现了曲线的重现. 本文用学习样本训练网络时, 不采用梯度下降的思想, 而直接令 $y_i = y_{oi}$[7], 由此得到如下线性方程组:

$$\sum_{k=1}^{n} w_k T_k(x_i) = y_{oi}, \quad i = 1, 2, \cdots, m \tag{4}$$

令 $b_i = y_{oi}$, 则(4)式表示成矩阵形式为:

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{w} = \boldsymbol{b} \in \boldsymbol{R}^m \tag{5}$$

其中,

$$\boldsymbol{A} = \begin{vmatrix} T_1(x_1) & T_2(x_1) & \cdots & T_n(x_1) \\ T_1(x_2) & T_2(x_2) & \cdots & T_n(x_2) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ T_1(x_m) & T_2(x_m) & \cdots & T_n(x_m) \end{vmatrix} \in \boldsymbol{R}^{m\times n},$$

$$\boldsymbol{w} = \begin{vmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_n \end{vmatrix} \in \boldsymbol{R}^n$$

不妨设矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的秩为 $r \le \min(m, n)$, 对 $\boldsymbol{A}$ 实施 Givens 变换[8] 得 $\boldsymbol{A}$ 的 $\boldsymbol{QR}$ 分解为

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{QR} \tag{6}$$

其中, $\boldsymbol{Q} \in \boldsymbol{R}^{m \times m}$ 的正交阵, $\boldsymbol{R} = \begin{vmatrix} \boldsymbol{R}_{11} & \boldsymbol{R}_{12} \\ \boldsymbol{R}_{21} & \boldsymbol{R}_{22} \end{vmatrix} \in \boldsymbol{R}^{m \times n}$, $\boldsymbol{R}_{11} \in \boldsymbol{R}^{r \times r}$, $\boldsymbol{R}_{12} \in \boldsymbol{R}^{r \times (n-r)}$, $\boldsymbol{R}_{21} \in \boldsymbol{R}^{(m-r) \times r}$, $\boldsymbol{R}_{22} \in \boldsymbol{R}^{(m-r) \times (n-r)}$, 且 $\boldsymbol{R}_{21} = 0$, $\boldsymbol{R}_{22} = 0$.

将 $\boldsymbol{A}$ 的 $\boldsymbol{QR}$ 分解代入线性方程组(5) 且两端乘以 $\boldsymbol{Q}^{-1}$得:

$$\boldsymbol{Rw} = \boldsymbol{Q}^{-1}\boldsymbol{b} \tag{7}$$

令 $\boldsymbol{w} = \begin{vmatrix} \boldsymbol{x} \\ \boldsymbol{z} \end{vmatrix}$, $\boldsymbol{Q}^{-1}\boldsymbol{b} = \begin{vmatrix} \boldsymbol{c} \\ \boldsymbol{d} \end{vmatrix}$, 其中, $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{c} \in \boldsymbol{R}^{r}$, $\boldsymbol{z}, \boldsymbol{d} \in \boldsymbol{R}^{(n-r)}$, 对线性方程组(7) 的求解讨论如下:

(1) $n \le m$ 的情形, 即设计网络隐层的节点数不大于样本数

若 $r = n$, 显然线性方程组(7) 有唯一解;

若 $r < n$, 但 $\boldsymbol{d}$ 为 $\boldsymbol{0}$, 线性方程组(7) 是相容的, 有无穷多解;

若 $r < n$, 但 $\boldsymbol{d}$ 不为 $\boldsymbol{0}$, 线性方程组(7) 是不相容的, 无精确解.

无论哪种情况, 令 $\boldsymbol{z} = \boldsymbol{0}$, 由 $\boldsymbol{R}_{11}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{c}$ 可求得:

$$\boldsymbol{w}^{*} = \begin{vmatrix} \boldsymbol{R}_{11}^{-1}\boldsymbol{c} \\ \boldsymbol{0} \end{vmatrix} \tag{8}$$

$\boldsymbol{w}^{*}$ 就是网络在最小二乘意义下的全局最优权值, 它可能不唯一, 若矩阵 $\boldsymbol{A}$ 是列满秩的, 即 $n \le m$ 且 $r = n$ 时, 则 $\boldsymbol{w}^{*}$ 唯一.

(2) $n > m$ 的情形

无论 $\boldsymbol{d}$ 为 $\boldsymbol{0}$ 或 $\boldsymbol{d}$ 不为 $\boldsymbol{0}$ 矢量, 由(8) 式求得的 $\boldsymbol{w}^{*}$ 是全局最优解.

由上述讨论可知, 在权值的学习过程中, 若求得的 $\boldsymbol{w}^{*}$ 具有使 $E(\boldsymbol{w}^{*}) = 0$ 的特点, 则获得全局最优最佳解. 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的秩为 r 时, 由(8) 式求得的 $\boldsymbol{w}^{*}$ 仅有 r 个值非零. 若 $r \ll n$ 时, 则通过学习获得 r 个非 0 网络权值的同时, 完成了网络结构的优化, 即在设计此应用网络时, 网络的隐层节点数设计为 r 个, 简化了网络的复杂性而达到相同的效果.

3 仿真实验

实验 1: 样本数据取自 $\sin(x)$ 函数, $x \in [0°, 180°]$, 每隔 18°取 1 样本, 共取 11 个样本, 隐层神经元个数取为 10, 网络结构如图 1 所示, 曲线重建结果如图 2 所示. 神经网络重建的曲线非常接近$\sin(x)$ 曲线, 图 2 中绘出的两条曲线基本重合, 将重建的曲线与原始曲线的误差绘制误差曲线如图 3 所示.

若采用文献[7] 中的方法, 其对 $\sin(x)$ 的逼近在 [8°, 25°] 中采用 4 个样本点的学习是有效的, 但若在 [0°, 180°] 中采用 11 个样本点进行学习, 实验结果表明, 网络重建的曲线在样本点处具有较高的精度, 但在非样本点处出现震荡.

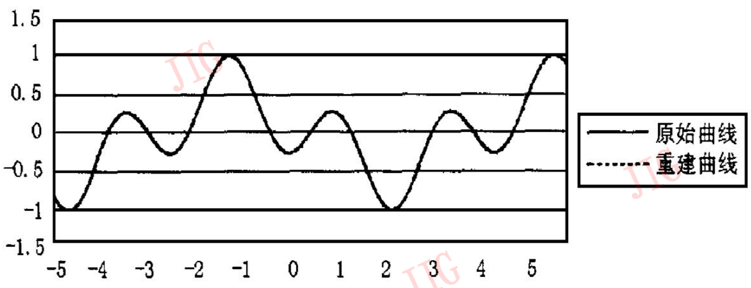

图 2 $\sin(x)$ 曲线重建

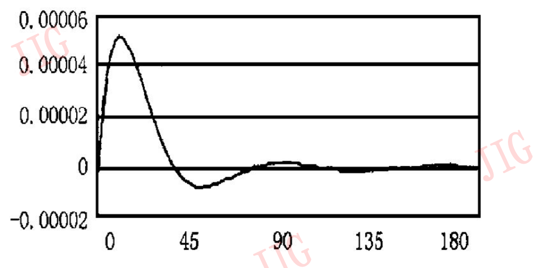

图 3 重建曲线与原始曲线的误差曲线

实验 2: 样本数据取自 $\sin(x)\cos(2x)$ 函数[5], $x \in [-5, 5]$, 每隔 0.25 取 1 样本, 共取 41 个样本, 隐层神经元个数取为 25, 曲线重建结果如图 4 所示, 图 5 为误差曲线.

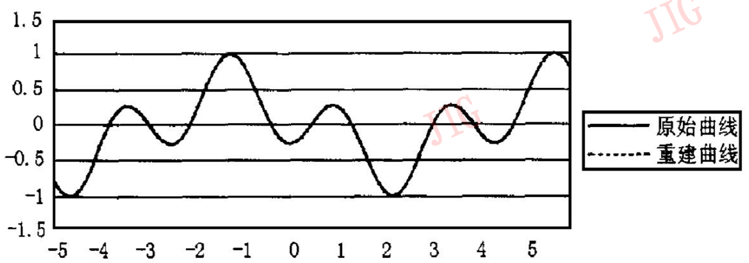

图 4 $\sin(x)\cos(2x)$ 曲线的重建

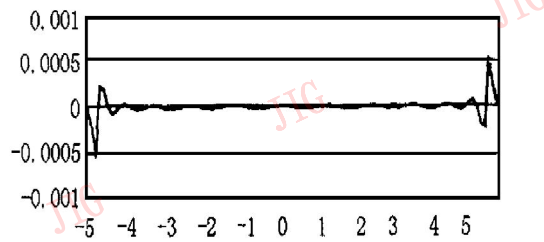

图 5 重建曲线与原始曲线的误差曲线

重建的效果非常好, 与 Yang[5] 中的结果相同. 但本文采用的学习算法不是基于梯度下降的迭代算法, 若采用梯度学习算法, 每次迭代均要计算 sigmoidial 函数值且迭代 20 万次后的误差为 0.2[5]. 故本文提出的方法计算量较 Yang 采用的方法少得多, 是一种快速的曲线重建方法, 且网络采用 Tchebycheff 正交多项式函数, 并不需将[－ 5, 5] 映射到[－ 1, 1] 进行训练.

4　结　论

本文提出的正交神经网络曲线重建方法, 其网络训练算法不存在初始权值和参数的选取问题, 不是基于梯度下降的迭代算法, 克服了传统的 BP 网络学习算法的迭代计算、收敛速度慢及可能陷入局部极小的问题. 神经网络设计简单, 且在样本训练结束时还完成对网络结构的优化, 确定了网络隐层神经元个数. 对复杂曲线重建的实验结果表明, 基于该正交神经网络的曲线重建, 不仅可用较少的样本点重建曲线, 在样本点处具有很高的逼近精度, 而且重建的曲线在非样本点处也具有很高的逼近精度, 故本文提出的方法是一种快速有效的曲线重建方法.

参 考 文 献

1　Rumelhart D E, Hinton G E, Williams R J. Learning internal representations by error back-propagation. In: Rumelhart D E, McClelland J L (eds), Parallel Distributed Processing. MA: MIT Press, 1986.

2　Fukuoka Y, Matsuki H et al. A modified back-propagation method to avoid false local minima. Neural Networks, 1998, 11 (6): 1059~ 1072.

3　Yam J Y F, Chow T W S. Extended least squares based algorithm for training feedforward networks. IEEE Transactions on Neural Networks, 1997, 8(3): 806~ 810.

4　Grzeszczuk R, Terzopoulos D, Hinton G. NeuroAnimator: Fast neural network emulation and control of physics-based models. Computer Graphics, 1998, 32(3): 1~ 12.

5　Yang S S, Tseng C S. An orthogonal neural network for function approximation. IEEE Transactions on System, Man, and Cybernetics, 1996, 26B(5): 779~ 785.

6　Hornik K, Stinchcombe M. Multilayer feedforward networks are universal approximation. In: White H (eds), Artificial Neural Networks: Approximation and Learning Theory, Blackwell Publishers, 1992, 13~ 28.

7　肖丹, 施渝萍. 正交投影神经网络. 计算机学报, 1996, 19(9): 673~ 678.

8　Golub G H, VanLoan C F. Matrix Computation. Johns Hopkins University Press, 1983.

9　切尼 E W. 逼近论导引. 上海: 上海科学技术出版社, 1981.

10　肖少拥, 冯树椿, 胡上序. 基于正交变换的神经网络学习算法. 清华大学学报(自然科学版), 1998, 38(s2): 148~ 149.

肖少拥　1967 年生, 1992 年 3 月毕业于浙江大学应用数学系, 获计算数学专业硕士学位, 现为浙江大学计算中心工程师, 浙江大学工业自动化专业博士生. 主要研究兴趣为算法分析、计算几何、人工神经网络.

金小刚　1995 年于浙江大学应用数学系获博士学位, 现为浙江大学 CAD & CG 国家重点实验室副研究员. 主要研究兴趣为计算机图形学、计算机动画、隐式曲面造型和动画等.

石文俊　1953 年生, 1979 年毕业于北京大学数学力学系, 现为浙江大学计算中心(玉泉) 主任, 高级工程师. 主要研究方向为算法分析、数据处理、计算机应用等. 主编或编著学术著作 5 部.