

遗传算法优化前向神经网络结构和权重矢量

黎明 严超华 刘高航

(南昌航空工业学院应用工程系, 南昌 330034)

摘要 提出了新的遗传算法优化设计前向神经网络的结构和权重矢量。这种新方法的创新在于:二值码串和实值码串的混合编码方法即保留了传统遗传算法的优点,又具有遗传编程和遗传策略的优点;结合遗传算子和 Solis and Wets 算法生成后代的方法丰富了遗传搜索空间的多样性,加快了遗传算法的收敛速度;对混合编码码串的动态参数编码方法提高了优化精度。

关键词 遗传算法 神经网络 优化 遗传编程 遗传策略

0 引言

神经网络方法是图象处理与模式识别中的最常用和最有效的方法之一,它已经成功地应用于指纹图象识别和各种图象滤波器设计。但是目前神经网络方法仍然面临三大问题^[1]:(1)难以确定神经网络的优化结构,例如难以确定前向神经网络的隐含层数和各层的神经元节点数;(2)学习时间较长,特别是训练大规模神经网络时学习时间太长,令人难以忍受;(3)传统的梯度法或基于损失函数的优化方法^[2]在有随机扰动下不能达到最佳效果,常常收敛于局部最优解。

遗传算法是由自然界的遗传进化理论发展而来,已经成功地解决了许多复杂的优化问题。它的最大的优点是:即使对多态的和非连续的函数,它也能获得全局最优解。因此许多作者都尝试将遗传算法与神经网络结合在一起^[2],利用遗传算法优化设计神经网络的结构和权重系数。在设计神经网络结构时,遗传算法可以自主地辩识最小的包含最优解的搜索空间。

目前已有4种方法通过遗传算法优化设计神经网络的结构和权重系数^[3-8]。

第一种方法:列出神经网络中所有的可能存在的神经元,将这些神经元之间所有的可能存在的连接权重系数都编码成二值码串或实数码串表示的个体(string),随机地生成这些码串的群体(population),

然后反复使用选择(selection),交换(crossover),变异(mutation)和其它的遗传算子对群体进行遗传优化计算。将码串反编码构成神经网络,计算所有训练样本通过此神经网络产生的平均误差可以确定每个码串表示的个体的适应度(fitness)。这种方法简单明了,但是用以遗传优化计算的运算量较大。当优化设计解决复杂问题的大规模神经网络时,随着神经元数目的大量增加,连接权重系数的总数也急剧增加,从而造成遗传算法搜索的空间急剧增大。

第二种方法:利用遗传算法优化设计的不仅是神经网络的结构,而且包括神经网络的学习规则和与之关联的参数。这类方法中有的还利用遗传算法优化设计码串个体的适应度的计算方程。这类方法并不将连接权重系数编码成码串,而是将未经训练的神经网络的结构模式和学习规则编码成码串表示的个体,因此遗传算法搜索的空间相对较小。相对于第一种方法,它的缺点是:对于每个选择的码串表示的个体都必须反编码构成未经训练的神经网络,再对此神经网络进行传统的训练以确定神经网络的连接权重系数。

第三种方法:介于对所有的连接权重系数都编码的第一种方法和不对任何连接权重系数编码的第二种方法之间,这种方法构造一空间填充曲线(space-filling curve)来确定神经网络输入层到第一层的函数,它的搜索空间与计算量都是适中的,但只能用于基于径向基础函数的神经网络(radial basis

function-RBF network)的优化设计。

第四种方法:利用遗传算法同时优化设计神经网络的结构和连接权重系数,即同时对神经网络的结构和连接权重系数都进行编码。Vittorio^[3]还提出了粒度(granularity)编码方法以提高连接权重系数的优化精度。Vittorio的粒度控制一方面加快了收敛到一定优化精度的遗传搜索时间,但另一方面会引起个体的适应度的剧烈不连续变化,从而又间接地导致遗传算法收敛速度变慢。

本文提出了一种新的遗传算法同时优化设计神经网络的结构和连接权重系数。这种新的遗传算法采用二值编码和实数值编码的混合编码方法:神经网络的结构采用二值编码,而神经网络的连接权重系数采用实数值编码。对表示神经网络的结构二值编码进行遗传运算可以保留 Vittorio 方法的优点,对表示神经网络的连接权重系数的实数值编码所进行的 Solis & Wets^[9] 运算又使新的遗传算法具有遗传编程 EP 和遗传策略 ES^[2,5] 的优点。同时,本文结合遗传算子生成后代(offspring)方法和 Solis and Wets^[9] 生成后代方法使得遗传搜索空间的群体中具有更多多样性(diversity)的个体,进而加快了遗传算法的收敛速度。本文还利用 DPE(dynamic parameter encoding)^[10] 的动态参数编码方法替代 Vittorio 的粒度控制方法,即提高了连接权重系数的优化精度,又避免了 Vittorio 粒度变化引起的适应度的剧烈不连续

变化。

1 遗传算法设计前向神经网络

本文提出了新的遗传算法同时优化设计前向神经网络的结构和神经元之间的连接权重系数。该算法的创新之处在于:二值码串和实值码串共存的混合编码方法,结合遗传算子和 Solis and Wets^[9] 算法生成后代的方法,对混合编码码串的 DPE 动态编码方法替代了 Vittorio^[3] 粒度控制方法。新的遗传算法的每一次遗传搜索过程如图 1 所示。首先选择一些群体中的个体作为遗传搜索过程中的父母(parents),这些个体中的一部分通过遗传算子生成后代,其它部分的个体通过 Solis & Wets 方法生成后代。然后计算所有后代的适应度,经过选择算子产生新的父母。反复进行上述的遗传搜索过程直到遗传算法收敛。

遗传算法(GA)可以表示为

$$GA = (P^0, \lambda, l, f, c, m) \quad (1)$$

其中 $p^0 = (a_1^0, \dots, a_n^0)$ 是起始的群体, $\lambda \in N$ (N 为自然数集合)为群体的大小, $l \in N$ 为码串的长度, f 是个体的适应度(或称为个体的目标函数), s 为选择算子, c 为交换算子, m 为变异算子。以下详细介绍本文提出的新的遗传算法。

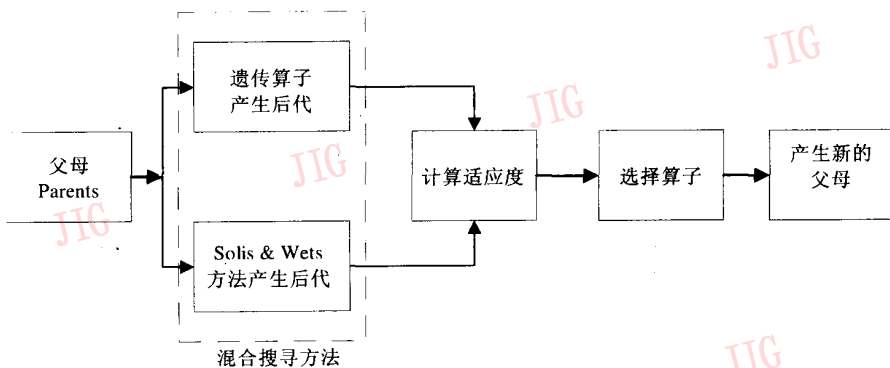


图1 新的遗传算法的遗传搜索过程

1.1 对神经网络结构和权重矢量的混合编码以及群体初始化

遗传算法在由码串表示的个体组成的群体上进行遗传算子运算,每个码串代表一种神经网络的结构和权重矢量。本文中神经网络的结构采用二值编码,而神经网络的连接权重系数采用实数值编码。如图 2 所示的两层前向神经网络的编码结果为:100111011100110,0.1,0.2,0.1,0.3,-0.3,0.4,-0.1,-0.1。两层前向神经网络有三个输入神经元和

如图 2 所示的两层前向神经网络的编码结果为:100111011100110,0.1,0.2,0.1,0.3,-0.3,0.4,-0.1,-0.1。两层前向神经网络有三个输入神经元和

一个输出神经元,隐含层最大的神经元数为3,因此每个输入神经元最多可与4个其它神经元相联,其结构编码为4位的二值码,二值码1表示有相联,而二值码0表示无相联。每个隐含层神经元最多可与1个输出神经元相联,其结构编码为1位的二值码。以第1号输入神经元为例,它分别与第4,7号神经元相联,结构编码是按神经元编号顺序以及与之相

联的神经元编号顺序来编排的,因此编码为1001。与第1号输入神经元结构编码对应的实值编码为0.1,0.2,表示1—4号神经元之间的权重系数为0.1,而1—7号神经元之间的权重系数为0.2。因此,混合编码的二值部分为固定长度,而实值部分为变长度,总的码串也为变长度。

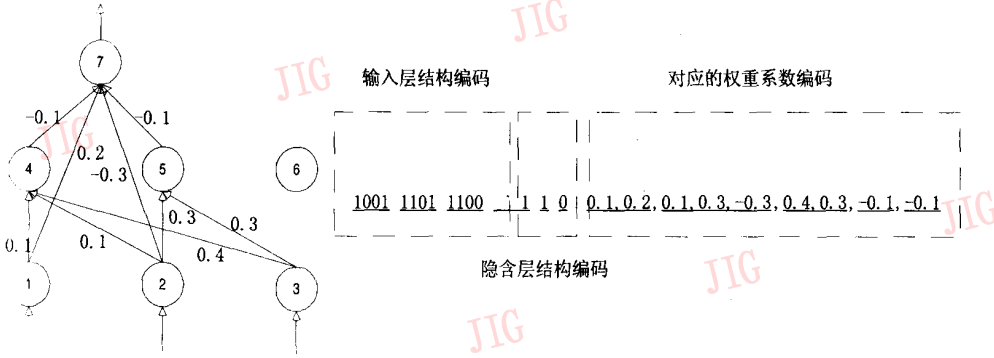


图2 对前向神经网络的结构与权重系数进行混合编码

在本文提出的上述混合编码方法的基础上,可以对表示神经网络结构的二值码串进行标准的遗传算子运算,从而保留了 Vittorio^[3]方法的优点:计算简单明了,遗传算子对遗传空间的搜索非常有效,易于扩展到大规模的神经网络的优化设计。同时对表示神经网络的连接权重系数的实数值编码所进行的 Solis & Wets^[9]运算又使新的遗传算法具有 EP 和 ES^[2,5]的优点^[11]。

串个体被选为进行下一次遗传运算的父母码串。

起始的群体 $p^0 \equiv (a_1^0, \dots, a_n^0)$ 中的每个码串 a_i^0 是随机产生的,但是实值编码被限定在可能的连接权重系数取值范围之内。起始码串采用均匀分布的随机分布函数产生,并成为下一次遗传搜索过程中个体的父母集合。

1.3 遗传算法的交换算子

交换算子使得遗传算法具有强大的搜索能力。本文提出的遗传算法只对码串中表示神经网络结构的二值码部分进行标准遗传算法的交换算子的运算,然后将对应的实值编码进行对等的交换来完成整个码串的交换算子的运算。对图2中的码串与另一码串所进行的单点交换运算如图3所示,神经网络的结构被交换,权重系数也相应地被交换,两个父母码串的权重系数分别为9个和10个,经过交换算子运算后,两个后代码串的权重系数分别变成11个和8个。多点的交换运算与单点交换运算类似,交换点和交换频度的选择参见参考文献[2,5,6]。

1.2 适应度计算和遗传算法的选择算子

将由码串表示的每个个体反编码为相应的神经网络,然后输入所有训练样本,计算神经网络的输出与期望输出之间的平均绝对误差(MAE 误差),将此误差的倒数作为此个体的适应度:

$$fitness = \frac{1}{\frac{1}{M} \sum_{i=1}^M |Y_i - Y_0|} \quad (2)$$

其中 M 为训练样本总数, Y_i 为第 i 个训练样本时神经网络的输出, Y_0 为期望输出。

1.4 遗传算法的变异算子

遗传算法的变异算子主要用于防止群体收敛到局部最优解(premature)。本文提出的遗传算法只对码串中表示神经网络结构的二值码部分进行标准遗传算法的变异算子的运算,类似于遗传算法的交换运算,还须对表示神经网络权重系数的实值编码进行对应的变化,如果某两个神经元之间的连接被变异算子取消,对应的权重系数的实值编码也被取消,如果变异算子增加了某两个神经元之间的连接,也要相应增加其权重系数的实值编码,编码值类同于

本文采用标准的选择算子决定群体中的哪些码

群体的初始化,被随机地确定。

这种对混合编码进行的遗传变异算子运算,对表示神经网络结构的二值码部分产生了较强的变异效果,而对表示神经网络权重系数的实值码部分变异效果较弱。因此提出了包含 Solis & Wets 算法的混合搜索方法来加强神经网络权重系数的变异效果。

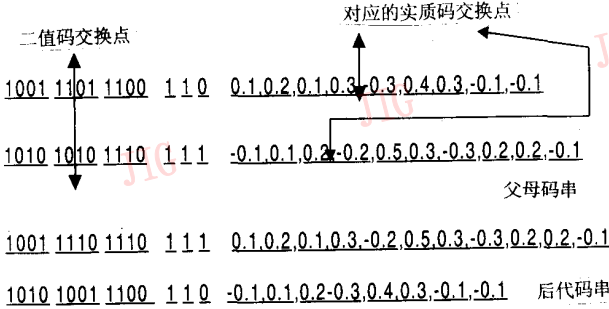


图3 混合编码下的交换算子运算

1.5 混合编码下的 Solis & Wets 算法

Vottrio 方法优化神经网络结构和权重系数时,对二值码串进行的遗传交换算子运算可能遇到的问题是^[11]:遗传交换算子趋于产生包含同样部件(结构和权重系数相同的子神经网络),而不能充分补充父母码串的隐含层神经元相关信息,这时多样化搜索遗传空间的任务由变异算子运算来完成。但本文提出的变异算子只对表示神经网络结构的二值码部分产生较强的变异效果,因此提出了对二值码串和实值码串的混合搜索方法产生后代,即对一部分个体通过对其二值码串进行遗传算子运算生成后代,其它个体则通过对其实值码串进行 Solis & Wets 运算生成后代,然后计算所有后代的适应度,经过选择算子产生新的父母。McDonnell^[12]对 Solis & Wets 运算进行了分布,指出其具有丰富了遗传搜索空间的特点,其效果与遗传编程 EP 和遗传策略 ES 对实值码串运算的效果类似。因此本文提出的混合编码下的 Solis & Wets 算法既保留了 Vittorio^[3]方法的优点,又使新的遗传算法具有遗传编程 EP 和遗传策略 ES 的优点^[2,5]。

将混合编码中表示神经网络每一个权重系数的实值码分别作为一个分量 x_i , 而整个实值码串就是一向量 X 。首先选取阈值参数^[9] $K_{max}, scnt, fcnt, \sigma_{ub}, \sigma_b, Ex, Ct$, 并且初始化变量 $k=0, scnt=0, fcnt=0, \sigma_0=1, B_0=0$, 其中 k 为搜索次数, K_{max} 为最大搜索次数。 $scnt, fcnt$ 为循环搜索过程的暂态变量, $scnt, fcnt$ 分别为 $scnt, fcnt$ 的比较阈值。 σ_0 为 Gaussian 随机矢量的初始方差, σ_{ub}, σ_b 分别为方差比较阈值。 Ex, Ct 都是方差步进系数。

B_0 为 Gaussian 随机矢量的初始均值矢量。将向量 X 作为初始搜索矢量 X_0 , Solis & Wets 算法如下:

(1) 设置方差变量为

$$\sigma_k = \begin{cases} Ex \cdot \sigma_{k-1}, & \text{如果 } scnt > Scnt \\ Ct \cdot \sigma_{k-1}, & \text{如果 } fcnt > Fcnt \\ \sigma_{ub}, & \text{如果 } \sigma_{k-1} < \sigma_b \\ \sigma_{k-1}, & \text{其它} \end{cases} \quad (3)$$

(2) 生成一多维 Gaussian 随机矢量: $\xi_k \sim N(B_k, \sigma_k I)$, 其中 I 为单位矢量。

(3) 计算公式(2)的适应度。

(a) 如果 $fitness(X_k + \xi_k) > fitness(X_k)$, 则:

$$X_{k+1} = X_k + \xi_k \quad (4)$$

$$B_{k+1} = 0.4\xi_k + 0.2B_k \quad (5)$$

$$scnt = scnt + 1 \quad (6)$$

$$fcnt = 0 \quad (7)$$

(b) 如果 $fitness(X_k - \xi_k) > fitness(X_k) > fitness(X_k + \xi_k)$, 则:

$$X_{k+1} = X_k - \xi_k \quad (8)$$

$$B_{k+1} = B_k - 0.4\xi_k \quad (9)$$

$$scnt = scnt + 1 \quad (10)$$

$$fcnt = 0 \quad (11)$$

(c) 否则:

$$X_{k+1} = X_k \quad (12)$$

$$B_{k+1} = 0.5B_k \quad (13)$$

$$fcnt = fcnt + 1 \quad (14)$$

$$scnt = 0 \quad (15)$$

(4) 如果 $k = K_{max}$, 停止 Solis & Wets 运算。否则 $k = k + 1$, 并返回第(1)步骤。

1.6 混合编码下的动态参数编码 DPE

在第一次混合编码和遗传搜索过程中,表示神经网络权重系数的实值编码采用较低的精度,此时实值码串的长度较短,遗传搜索的空间较小,遗传搜索的收敛速度较快。第一次遗传搜索收敛时,提高表示神经网络权重系数的实值编码的精度,即提高第一次遗传搜索收敛得到的后代组成的群体的实值编码的精度并作为下一次遗传搜索的起始群体,直到遗传搜索收敛,这就是所谓的动态参数编码 DPE 方法。DPE 编码反复进行,直到获得满意的权重系数精度。由于上一次遗传搜索得到的收敛结果可以限定下一次遗传搜索的起始群体的实值编码取值范围,下一次遗传搜索的空间进一步减小。

这种对混合编码下的动态参数编码方法同样可以

起到提高神经网络参数优化精度的效果,又避免了 Vittorio 粒度变化引起的适应度的剧烈不连续变化。在 Vittorio 方法中,同一次搜索过程中某一个体粒度发生变化时,引起其对应的神经网络所有权重系数编码都发生变化,因此这个个体的适应度相对于同一群体中其它个体的适应度也发生剧烈不连续变化,最终减慢遗传搜索的收敛速度。

2 试验结果与结论

对于用于英文字符识别的三层前向神经网络的结构和权重系数的优化设计任务,采用本文提出的遗传算法与 Vittorio 方法及 BP 方法进行实验对比,结果如图 4 所示。三层前向神经网络有 49 个输入,分别对应于 7×7 像素点大小的字符图象的每个像素点灰度,神经网络输出层有 26 个神经元,分别对应 26 个英文字符。图 4 的横坐标分别表示遗传搜索次数和 BP 学习次数,它们是以 10000 次为单位的;纵坐标表示设计出的神经网络结构和权重系数的适应度。由图 4 可以看出本文提出的遗传算法收敛速度快,神经网络权重系数精度高。本文提出的算法与 Vittorio 算法在收敛后产生的神经网络结构相同。

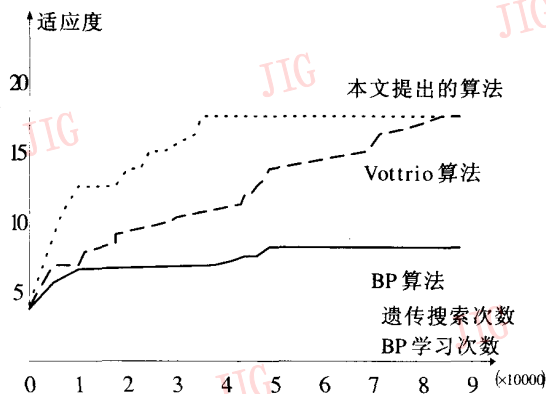


图 4 本文提出的遗传算法与 Vittorio 方法及 BP 方法的实验对比结果

黎明 1985 年于上海交通大学电子工程系获学士学位,1990 年和 1997 年于南京航空航天大学自动控制系及测试工程系分别获硕士和博士学位,副研究员。主要从事图象处理,模式识别,神经网络和遗传算法等方面的研究工作。已发表学术论文 20 余篇。



本文提出的遗传算法采用了动态参数编码方法对神经网络的结构和权重系数进行了二值和实值的混合编码,在混合编码的基础上结合了遗传算子和 Solis & Wets 运算,即保留了 Vittorio 方法的优点又具有 EP 和 ES 的优点,加快了遗传算法收敛速度,提高了连接权重系数的优化精度。

参考文献

- Muhlenbein H. Limitations of multi-layer perception networks-steps towards genetic neural networks. *Parallel Computing*, 1990, 14: 249 ~ 260.
- David B F. An introduction to simulated evolutionary optimization. *IEEE Transactions on Neural Networks*, 1994, 5:3 ~ 14.
- Vittorio M. Genetic evolution of the topology and weight distribution of neural networks. *IEEE Transactions on Neural Networks*, 1994, 5:39 ~ 53.
- Bruce A W, Timothy D C. Evolving space-filling curves to distribute radial basis functions over an input space. *IEEE Transactions on Neural Networks*, 1994, 5:15 ~ 23.
- Yao X. A reviews of evolutionary artificial neural networks. *International Journal of Intelligent Systems*, 1993, 8:539 ~ 567.
- Koza J R, Rice J P. Genetic generation of both the weights and architecture for a neural network. *International Joint Conference on Neural Networks, IJCNN-91-Seattle*, 1991:397 ~ 404.
- Bornholdt S, Graudenz D. General asymmetric neural networks and structure design by genetic algorithms. *Neural Networks*, 1992, 5:327 ~ 334.
- Harp S A, Samad T, Guha A. Towards the genetic synthesis of neural networks. In: *Proceedings of the Third International Conference on Genetic Algorithms*, 1989.
- Solis F J, Wets J B. Minimization by random search techniques. *Mathematics of Operations Research*, 1981, 6:19 ~ 50.
- Schraudolph N N, Belew R K. Dynamic parameter encoding for genetic algorithms. *Machine Learning*, 1992, 9:9 ~ 21.
- Peter J A, Gregory M S, Jordan B P. An evolutionary algorithm that constructs recurrent neural networks. *IEEE Transactions on Neural Networks*, 1994, 5:54 ~ 64.
- McDonnell J R, Waagen D. Evolving recurrent perceptrons for time-series modeling. *IEEE Transactions on Neural Networks*, 1994, 5:24 ~ 38.

严超华 1982 年于复旦大学数学系获学士学位,1984 年于东南大学数理力学系获硕士学位,副教授。主要从事力学和图象处理等方面的研究工作。



刘高航 1969年于南京航空航天大学自动控制系获学士学位,教授。主要从事测试技术和模式识别等方面的研究工作。

Optimizing Structure and Connection Weights of Feedforward Neural Networks Using Genetic Algorithms

Li Ming, Yan Chaohua and Liu Gaohang

(Department of Applied Engineering, Nanchang Institute of Aeronautical Technology, Nanchang 330034)

Abstract A new genetic algorithm is proposed to optimize the topology and connection weights for neural networks. The mixed encoding schema of binary and real value code not only retains the advantages of traditional genetic method but also gains the advantages of evolutionary programming and evolution strategies. The offspring generation method which combines the genetic operators and Solis and Wets operator diversifies the search space and speeds up the convergence of genetic search. And the dynamic parameter encoding method for the mixed code can obtain more precise connection weights.

Keywords Genetic algorithm, Neural networks, Optimization, Evolutionary programming, Evolution strategies

中国计算机用户协会图象分会 1999 年年会 征文通知

中国计算机用户协会图象分会 1999 年年会定于本年 11 月在江苏省无锡市召开,此次年会将是本世纪末的一次盛会,意义重大。会议主题是“推广图象应用、促进经济发展”,会上将围绕主题开展学术论文交流,并就当前计算机图象图形领域的热点问题邀请专家作专题报告,所有会上发表的论文将收入年会论文集,其中优秀论文将推荐给《中国图象图形学报》或有关计算机应用的报刊发表,欢迎广大从事计算机图象工作的人士踊跃投稿。

征文有关事宜规定如下:

1 征文内容

(1) 图象处理与识别技术的应用

- 医学应用
- 艺术与广告中的应用
- 其它应用
- 影视与多媒体中的应用
- 仿真应用
- 印刷出版系统中的应用
- GIS 中的应用

(2) 静、动图象压缩技术

(3) 图象数据交换与传输

(4) 图象数据管理与图象数据库

(5) 图象处理与识别的新技术

2 征文截止时间 1999 年 9 月 30 日

3 投稿联系地址

来稿请寄:100083 北京市海淀区学院路 37 号 北京航空航天大学图象分会

联系人:孙慧贤

电话:(010)82316564(兼 FAX)