DOI: 10.11992/tis.201706037
网络出版地址: http://kns.cnki.net/kcms/detail/23.1538.TP.20171109.1250.012.html

基于自编码器的特征迁移算法

杨梦铎[1], 栾咏红[1], 刘文军[1], 李凡长[2]
（1. 苏州工业职业技术学院 软件与服务外包学院, 江苏 苏州 215104; 2. 苏州大学 计算机科学与技术学院, 江苏 苏州 215006）

摘　要: 近年来, 栈式自编码网络（stacked auto-encoder, SAE）在大规模数据集上表现出优异的图像分类性能。相对于其他图像分类方法中手工设计的低级特征, SAE 的成功归因于深度网络能够学习到丰富的中级图像特征。然而, 估计上百万个网络参数需要非常庞大的带标签的图像样本数据集。这样的性质阻止了 SAE 在小规模训练数据上的许多应用。在这篇文章中, 提出的算法展示如何将 SAE 在大规模数据集上学习到的图像表示有效地迁移到只有有限训练数据的视觉识别任务中。实验部分设计了一个方法来复用在 MNIST 数据集上训练得到的隐藏层, 以此计算在 MNIST-variations 数据集上的中级图像表示。实验结果展示了尽管两个数据集之间存在差异, 但是被迁移的图像特征能够使得模型的分类性能得到极大的提升。

关键词: 自编码器; 特征迁移; 深度网络; 深度学习; 图像分类; 中级图像特征; 视觉识别; 大规模数据集
中图分类号: TP181　　**文献标志码:** A　　**文章编号:** 1673−4785(2017)06−0894−05

中文引用格式: 杨梦铎, 栾咏红, 刘文军, 等. 基于自编码器的特征迁移算法[J]. 智能系统学报, 2017, 12(6): 894–898.
英文引用格式: YANG Mengduo, LUAN Yonghong, LIU Wenjun, et al. Feature transfer algorithm based on an auto-encoder[J]. CAAI transactions on intelligent systems, 2017, 12(6): 894–898.

Feature transfer algorithm based on an auto-encoder

YANG Mengduo[1], LUAN Yonghong[1], LIU Wenjun[1], LI Fanzhang[2]
(1. Department of Software and Service Outsourcing, Suzhou Vocational Institute of Industrial Technology, Suzhou 215104, China; 2. School of Computer Science and Technology, Soochow University, Suzhou 215006, China)

Abstract: The stacked auto-encoder (SAE) has recently shown outstanding image classification performance in large-scale datasets. Relative to the low-level features of artificial design in other image classification methods, the success of SAE is its deep network that can learn rich mid-level image features. However, estimating millions of parameters requires a very large number of annotated image samples, and this prevents many SAE applications to small-scale training data. In this paper, the proposed algorithm shows how to efficiently transfer image representation learned by SAE on a large-scale dataset to other visual recognition tasks with limited training data. In the experimental section, a method is designed to reuse the hidden layers trained on MNIST datasets to compute the mid-level image representation of MNIST-variation datasets. Experimental results show that, despite differences in image datasets, the transferred image features can significantly improve the classification performance of the model.

Keywords: auto-encoder; feature transfer; deep network; deep learning; image classification; mid-level image representation; visual recognition; large-scale datasets

相比于浅层网络, 由单层模块堆叠形成的深度网络具有更加有效的函数表征能力。通过预训练与微调过程, 深度网络能够学习到高度非线性函数的一种更加紧凑的表示, 并且同时具备优秀的泛化能力。无监督的预训练过程往往涉及某种特征检测模型, 常用的有自编码器（auto-encoder, AE）[1-3]和受限玻尔兹曼机（restricted Boltzmann machine, RBM）[4-8]。

收稿日期: 2017−06−10.　**网络出版日期:** 2017−11−19.
基金项目: 国家自然科学基金项目 (61672364).
通信作者: 杨梦铎. E-mail: mengduoyang@163.com.

堆叠自编码器得到的深度网络与堆叠受限玻尔兹曼机得到的深度网络具有相近的性能。相较而言, 自编码器深度网络作为深度学习中更为简单的模型, 拥有更易于理解的理论基础与实现过程。

近年来, 自编码器及其改善的版本(如降噪自编码器[9-12]、收缩自编码器[13-14])在模式识别领域中展现出优异的性能。相对于手工设计的低层次特征, 这些深度网络的成功归因于它们学习丰富的中间层特征表示的能力。然而为了估计上百万的参数, 有监督的微调过程需要大量的带标签的样本。于是, 在深度网络强有力的模型表达能力下, 如果提供的有标签样本数量太少就非常容易造成过拟合的问题。这样的性质就阻止了堆叠的自编码器在有限训练数据下的施展应用。

为了解决这个问题, 我们提取栈式自编码器在大数据集上学到的图像特征并迁移到只有有限训练数据的视觉识别任务中。设计的方法复用 MNIST 数据集上训练的隐藏层, 为小型 MNIST 变体数据集来计算中间层的图像表示。实验结果表明, 尽管源任务与目标任务中的两组数据存在差异, 迁移的表示能够导致更加高效和更加准确的识别结果。

1　自编码器

自编码器属于一种特殊的人工神经网络(artificial neural network, ANN), 采用反向传播算法(back propagation, BP)进行优化。作为无监督的特征检测模型, 自编码器能够学习到输入数据的另一种特征表示。典型的模型由输入层、隐藏层和输出层构成, 并且输入层和输出层具有相同个数的神经元。自编码器的目标是尽可能地让输入等于输出, 那么中间的隐藏层就必须捕捉能够代表输入的最重要因素, 以此给出输入的另一种表示。图 1 给出了一个典型自编码器的示意图。

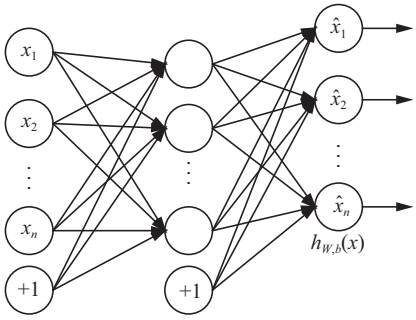


图 1　自编码器示意图

Fig. 1　Auto-encoder diagram

$h_{W,b}(\boldsymbol{x})$定义了一个复杂且非线性的函数以对每一个训练样本$\boldsymbol{x} \in R^n$进行拟合, 其中 $\boldsymbol{W}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 是网络的权值(weight)参数和偏置参数(bias), x_i 表示 $\boldsymbol{x}$ 的第 i 特征, n 表示样本的维度, +1 表示输入层和隐藏层的偏置结点。在输出层, $h_{W,b}(\boldsymbol{x})$由神经网络的激活函数(activation function)给出了网络的输出。

$$h_{W,b}(\boldsymbol{x}) = f(\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{b}) = f(\sum_{i=1}^{n} W_i x_i + b)$$

常用的激活函数包括逻辑函数(logistic)以及双曲正切函数(tanh)[15]:

$$f_{\mathrm{logistic}}(\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{b}) = \frac{1}{1 + \mathrm{e}^{-(\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}+\boldsymbol{b})}}$$

$$f_{\tanh}(\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{b}) = \frac{\mathrm{e}^{\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}+\boldsymbol{b}} - \mathrm{e}^{-(\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}+\boldsymbol{b})}}{\mathrm{e}^{\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}+\boldsymbol{b}} + \mathrm{e}^{-(\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}+\boldsymbol{b})}}$$

在神经网络训练过程中, 需要最小化网络输入输出差值。由于自编码器的无监督性, 需要将损失函数(loss function)$J(\boldsymbol{W},\boldsymbol{b})$由最小化输出值和对应标签值之间的差异替换为最小化输入值和输出值之间的差异。改变后的损失函数公式为

$$J(\boldsymbol{W},\boldsymbol{b}) = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\frac{1}{2}\left\|h_{W,b}\left(\boldsymbol{x}^{(i)}\right) - \boldsymbol{x}^{(i)}\right\|_2^2 + \frac{\lambda}{2}\|\boldsymbol{W}\|_2^2$$

2　栈式自编码网络

栈式自编码网络是将多个自编码器堆叠而成的深度网络, 也是深度学习的一个典型模型。当将原始数据输入到首个训练好的自编码器后, 它的隐藏层就学习到了一阶特征表示。然后这层隐藏层特征就作为另一个自编码器的输入, 用来学习二阶特征表示。以此类推, 原始数据的多阶特征表示便可以逐一得到。在构建深度网络的时候, 各个自编码器需要去除输出层, 只保留各阶学习到的特征表示。图 2 给出了包含两个隐藏层和一个最终分类器输出层的栈式自编码网络。

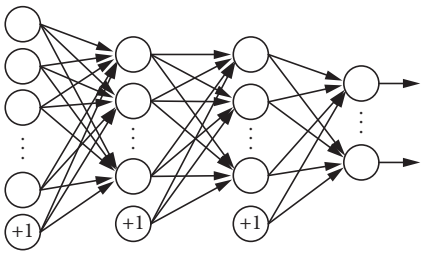


图 2　栈式自编码器示意图

Fig. 2　Stacked auto-encoder diagram

3　特征迁移模型

通常, 含有多个隐藏层的栈式自编码网络包含数以百万个模型参数。要训练这样的深度网络, 需要大量的带标签的训练数据集。然而, 现实中这样规模庞大的有标签数据集并不多见, 直接从几百个或者几千个训练图像中学习如此众多的参数是一件十分困难的事情。现有的解决方式包括手工标注数

据集或者进行数据扩充，不仅需要繁复的工作，而且极大地增加了任务的执行时间。那么，需要每次都为新的识别任务寻找上万个有标签的数据集吗？

特征迁移模型的关键思想是将栈式自编码网络的内部隐藏层当作一个通用的中间级图像特征提取器。在源任务（source task）数据集（如 MNIST）上预训练得到的图像特征能够被复用在其他的目标任务（target task）数据集（如 MNIST variations）上。模型如图 3 所示，图中省略了偏置结点。

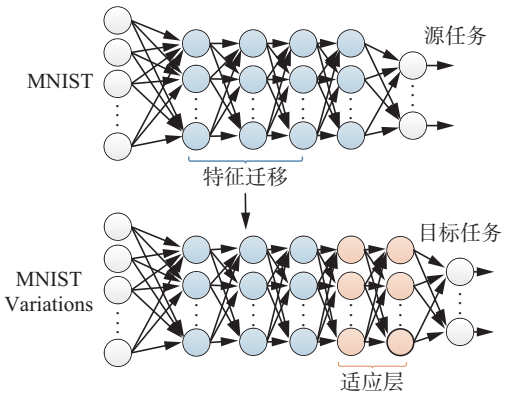


图 3　特征迁移模型示意图

Fig. 3　Feature transfer model diagram

对于源任务，我们采用含有 4 层隐藏层的栈式自编码网络。图 3 中第 1 个神经网络模型中最左层 L_1 为网络的输入层（input layer），中间 L_2、L_3、L_4、L_5 是 4 个隐藏层（hidden layer），最后一层 L_6 为输出层（output layer）。记 $a_j^{(i)}$ 表示第 i 层第 j 个神经元的输出值，当层数是 1 时有 $\boldsymbol{a}^{(1)}=\boldsymbol{x}$。在整个栈式自编码网络中，将上一层的输出作为下一层的输入。在第 l 层，$\boldsymbol{W}^{(l)}$ 和 $\boldsymbol{b}^{(l)}$ 分别表示网络中该层上的权重向量和偏置向量，$\boldsymbol{z}^{(l)}$ 表示该层的输入。那么，第 l+1 层的输出可由式 (1)、(2) 获得：

$$\boldsymbol{z}^{(l+1)}=\boldsymbol{W}^{(l)}\boldsymbol{a}^{(l)}+\boldsymbol{b}^{(l)} \tag{1}$$

$$\boldsymbol{a}^{(l+1)}=f\left(\boldsymbol{z}^{(l+1)}\right) \tag{2}$$

利用式 (1)~(2)，可以依次计算出图 3 中第 1 个神经网络的 L_2、L_3、L_4、L_5 的输出值，从而可以以前向传播（forward propagation）的方式得到整个栈式自编码网络的输出 $h_{\boldsymbol{W},\boldsymbol{b}}(\boldsymbol{x})$。

目标任务旨在为 MNIST-variations 数据集输出正确的数字标签。由于手工标注数据集费时费力，因此在一定程度上限制了 MNIST-variations 的规模。为了在小规模数据集上顺利地训练深度网络并获得正确的识别结果，特征迁移模型保留在大规模数据集上训练的网络模型参数，作为中间级特征迁移到新的识别任务中。在上述含有 4 层隐藏层的栈式自编码网络的基础上，保持前三层隐藏层的网络参数不变，移除最后一层隐藏层，并在靠近输出层增加两层随机初始化的隐藏层，以此获得目标任务的栈式自编码网络结构。通过这样的设置，模型既保留了 MNIST 数据集的中级图像特征，又为 MNIST-variations 上进行训练时留有调整的余地。

特征迁移模型具有能够通过实验证明的理论依据，即尽管不同图像的表现形式不同，但它们共享低中级层次的图像特征[16]。图像低级特征通常代表图像中特定的方向和位置上的边缘，通过发现边缘的特定排列来检测图形；中级特征能够集合这些图形到更大的组合，一般对应于熟悉的物体部件。而新网络模型所增加的两层隐藏层，作为适应层，能够检测到由部件组合而成的完整物体，在手写体数字的例子中即对应于完整的字符。

网络模型的输出层采用 Softmax 分类器来解决多分类问题，输出层的神经元个数 k 代表样本类标签的 k 个可取值。因此，对于 m 个训练样本 $\{(\boldsymbol{x}^{(i)},y^{(i)})\}_{i=1}^{m}$，有 $y^{(i)}\in\{1,2,\cdots,k\}$。输出层第 i 个神经元的输出值表示输入样本 $\boldsymbol{x}$ 属于第 i 类的概率 $p(y=i|\boldsymbol{x})$，$i\in\{1,2,\cdots,k\}$。Softmax 分类器对应的假设函数为

$$h_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{x})=\begin{bmatrix}p(y=1|\boldsymbol{x};\boldsymbol{\theta})\\ \vdots\\ p(y=k|\boldsymbol{x};\boldsymbol{\theta})\end{bmatrix}=\frac{1}{\sum_{i=1}^{k}\mathrm{e}^{\boldsymbol{\theta}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}}}\begin{bmatrix}\mathrm{e}^{\boldsymbol{\theta}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}}\\ \vdots\\ \mathrm{e}^{\boldsymbol{\theta}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}}\end{bmatrix}$$

式中：$\boldsymbol{\theta}=[\boldsymbol{\theta}_1\,\boldsymbol{\theta}_2\cdots\boldsymbol{\theta}_k]^{\mathrm{T}}$ 表示最后一层隐藏层与输出层之间连接的权重向量，$\frac{1}{\sum_{i=1}^{k}\mathrm{e}^{\boldsymbol{\theta}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}}}$ 是保证最后概率值总和为 1 的归一化项。Softmax 分类器的目标函数采用交叉熵（cross entropy）的形式。

$$J(\boldsymbol{\theta})=-\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{k}1\left\{y^{(i)}=j\right\}\log\frac{\mathrm{e}^{\boldsymbol{\theta}_j^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}^{(i)}}}{\sum_{l=1}^{k}\mathrm{e}^{\boldsymbol{\theta}_l^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}^{(i)}}}$$

式中：指示函数（indicator function）$1\{y^{(i)}=j\}$ 的定义为

$$1\left\{y^{(i)}=j\right\}=\begin{cases}1, & y^{(i)}=j\\ 0, & y^{(i)}\neq j\end{cases}$$

4　实验比较

MNIST 数据集由 0 ~ 9 的手写体数字组成，10 种数字构成了 10 类数据。MNIST 包含 60 000 张训练图像和 10 000 张测试图像。图 4 给出了 MNIST 数据集的一些示例样本。

MNIST variations 包含 MNIST 的 4 种变体数据集，包括：MNIST-rot，即在手写体数字上施加一些随机旋转；MNIST-back-rand，即在数字图像中插入随机的背景；MNIST-back-image，一小块黑白图像被用作数字图像的背景；MNIST-rot-back-image，即 MNIST-rot 与 MNIST-back-image 相结合。图 5 给出了 MNIST-variations 数据集的一些示例样本。

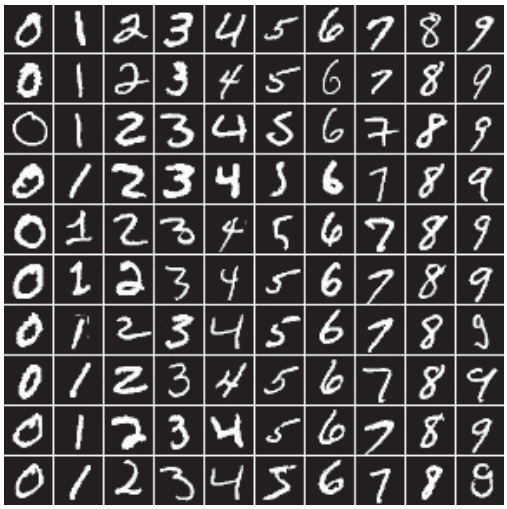


图 4　MNIST 示例样本

Fig. 4　MNIST samples

图 5　MNIST-variations 示例样本

Fig. 5　MNIST-variations samples

特征迁移模型所使用的两个栈式自编码网络的网络结构中神经元结点的分布如下: 第 1 个网络隐藏层结点数依次为[784, 200, 100, 50, 100, 10], 第 2 个网络依次为[784, 200, 100, 50, 100, 200, 10]。在 MNIST 数据集上训练得到的中级图像特征如图 6。

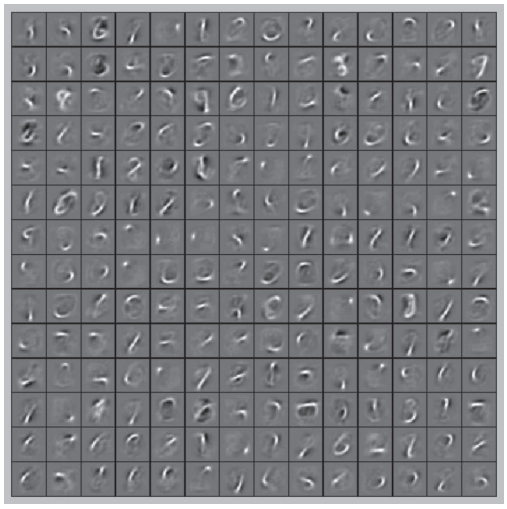


图 6　MNIST 中级特征

Fig. 6　MNIST mid-level features

借助中级图像特征的迁移, 在 MNIST-variations 数据集上同样获得了不错的中级图像特征, 如图 7 所示。

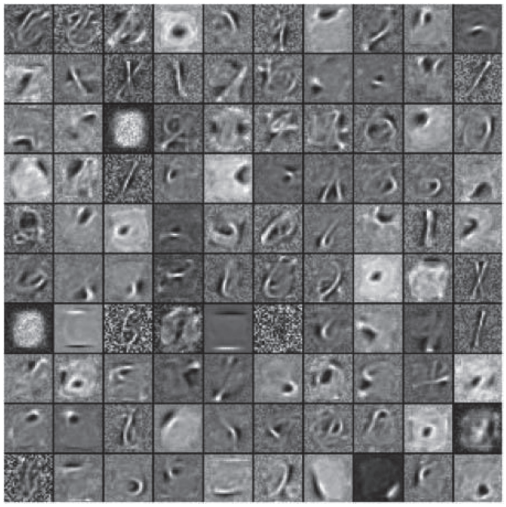


图 7　MNIST-variations 中级特征

Fig. 7　MNIST-variations mid-level features

为了验证特征迁移模型的识别效果, 输出层全部采用 Softmax 分类器进行分类, 我们在 MNIST-variations 数据集上利用栈式自编码网络(stacked auto-encoder, SAE)、受限玻尔兹曼机(restricted Boltzmann machine, RBM)、降噪自编码器(denoising auto-encoder, DAE)、收缩自编码器(contracting auto-encoder, CAE)分别与特征迁移模型的分类错误率进行实验比较, 比较结果如表 1 所示。

表 1　分类错误率

Table 1　Classification error rate　　%

方法	SAE	RBM	DAE	CAE	FTM
MNIST-rot	2.17	2.04	2.05	1.82	1.26
MNIST-back-image	1.78	1.37	1.18	1.14	1.04
MNIST-rot-back-image	2.87	2.71	2.65	2.59	2.46
MNIST-back-rand	1.97	1.83	1.79	1.76	1.68

5　结束语

作为深度学习模型的一种, 栈式自编码网络在模式识别领域已然卓有成效。相对于手工设计的低级特征而言, 深度网络的成功主要归因于它们学习丰富的中间级特征的能力。然而在现实应用中, 带有标签的大规模数据集通常是稀缺的。在深度神经网络强大的表征能力下, 数据不充足往往会使模型陷入过拟合的尴尬情形。为了解决在小规模数据样本下训练深度神经网络的问题, 我们提出一个特征迁移模型。我们展示了如何将学习到的中级图像特征有效地迁移到新的视觉识别任务中。实验结果表

明，尽管源任务与目标任务采用的数据集之间存在差异，但是特征迁移模型仍然能够训练出目标数据集的图像特征，并且在目标任务的识别过程中能够达到优于经典深度学习模型的分类效果。

参考文献：

[1] HINTON G E, ZEMEL R S. Autoencoder minimum description length and helmholtz free energy[C]//Conference on Neural Information Processing Systems(NIPS). Denver, USA, 1993: 3–10.

[2] SOCHER R, HUANG E H, PENNINGTON J, et al. Dynamic pooling and unfolding recursive autoencoders for paraphrase detection[C]//Proc Neural Information and Processing Systems. Granada, Spain, 2011: 801–809.

[3] SWERSKY K, RANZATO M, BUCHMAN D, et al. On score matching for energy based models: generalizing autoencoders and simplifying deep learning[C]//Proc Int'l Conf Machine Learning Bellevue. Washington, USA, 2011: 1201–1208.

[4] FISCHER A, IGEL C. An introduction to restricted Boltzmann machines[C]//Progress in Pattern Recognition, Image Analysis, Computer Vision, and Applications. Guadalajara, Mexico, 2012: 14–36.

[5] BREULEUX O, BENGIO Y, VINCENT P. Quickly generating representative samples from an RBM-derived process[J]. Neural computation, 2011, 23(8): 2053–2073.

[6] COURVILLE A, BERGSTRA J, BENGIO Y. Unsupervised models of images by spike-and-slab RBMs[C]//Proc Int'l Conf Machine Learning. Bellevue, Washington, USA, 2011: 1145–1152.

[7] SCHMAH T, HINTON G E, ZEMEL R, et al. Generative versus discriminative training of RBMs for classification of fMRI images[C]//Proc Neural Information and Processing Systems. Vancouver, Canada, 2008: 1409–1416.

[8] ERHAN D, BENGIO Y, COURVILLE A, et al. Why does unsupervised pre-training help deep learning?[J]. Machine learning research, 2010, 11: 625–660.

[9] VINCENT P. Extracting and composing robust features with denoising auto-encoders[C]//International Conference on Machine Learning(ICML). Helsinki, Finland, 2008: 1096–1103.

[10] VINCENT P, LAROCHELLE H, LAJOIE I, et al. Stacked denoising autoencoders: learning useful representations in a deep network with a local denoising criterion[J]. Machine learning research, 2010, 11: 3371–3408.

[11] CHEN M, XU Z, WINBERGER K Q, et al. Marginalized denoising autoencoders for domain adaptation[C]//International Conference on Machine Learning. Edinburgh, Scotland, 2012: 1206–1214.

[12] VINCENT P. A connection between score matching and denoising autoencoders[J]. Neural computation, 2011, 23(7): 1661–1674.

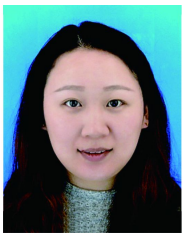
[13] RIFAI S. Contractive auto-encoders: explicit invariance during feature extraction[C]//Proceedings of the Twenty-eight International Conference on Machine Learning. Bellevue, USA, 2011: 833–840

[14] RIFAI S, BENGIO Y, DAUPHIN Y, et al. A generative process for sampling contractive auto-encoders[C]//Proc Int'l Conf Machine Learning. Edinburgh, Scotland, UK, 2012: 1206–1214.

[15] LECUN Y. Neural networks: tricks of the trade (2nd ed.) [M]. Germany: Springer, 2012: 9–48

[16] ZEILER M D, TAYLOR G W, FERGUS R. Adaptive deconvolutional networks for mid and high level feature learning[C]//IEEE International Conference on Computer Vision. Barcelona, Spain, 2011: 2013–2025.

作者简介：



杨梦铎，女，1989 年生，讲师，博士，主要研究方向为模式识别与机器学习。

栾咏红，女，1968 年生，副教授，主要研究方向为强化学习。

刘文军，男，1981 年生，讲师，博士，主要研究方向为无线传感网络与算法分析。