

一种多层前馈神经网络的快速修剪算法

乔俊飞,张颖

(北京工业大学 电子信息与控制工程学院,北京 100022)

摘要:针对目前神经网络在应用中难于确定隐层神经元数的问题,提出了一种神经网络结构的快速修剪算法.该算法在最优脑外科算法(OBS)的基础上,通过直接剔除冗余的隐层神经元实现神经网络结构自组织设计.实验结果表明,快速修剪算法与常规的最优脑外科算法相比,具有更简单的网络结构和更快的学习速度.

关键词:最优脑外科算法;神经网络修剪算法;自组织设计算法

中图分类号:TP183 **文献标识码:**A **文章编号:**1673-4785(2008)02-0173-04

Fast unit pruning algorithm for multilayer feedforward network design

QIAO Jun-fei, ZHANG Ying

(College of Electronic and Control Engineering, Beijing University of Technology, Beijing 100022, China)

Abstract: For it is difficult to determine the numbers of hidden neurons in the application of neural networks, a fast unit pruning algorithm for the structure of neural network was presented in the paper. The algorithm which based on optimal brain surgeon(OBS) eliminated the unneeded hidden neurons directly, in which way carried out the self-organization design on the structure of neural networks. The results of comparative studies with OBS showed that the fast unit pruning algorithm could reduce both neural network complexity and training time.

Keywords: optimal brain surgeon; neural network pruning; self-organization design

多层前馈神经网络(multilayer feedforward neural network, MFNN)是目前应用最为广泛的神经网络模型之一,尽管其训练算法之一的BP算法已成功应用于许多实际问题,但是BP算法仍需事先确定网络结构且易陷入局部极小,收敛速度极慢.因此,神经网络结构设计已成为当前神经计算科学中人们共同关注的问题.众所周知,一个规模过大的MFNN能很好地学习训练样本,输出误差小,但是往往会出现网络的过度拟合现象,从而使泛化能力较差^[1];另一方面,规模过小的MFNN虽具有较好的泛化能力,但完成对训练样本的学习较为困难.为了使神经网络在保持良好性能的同时具有最小的网络规模,近年来,相继有一些神经网络结构优化方法被提出:1)凑试法^[2],由模型查找优化结构,主要通

过训练和比较不同网络结构的途径来实现;备受推崇的方法有交叉校验^[3];2)网络生长,由一个小规模的网络结构开始,训练过程中,针对实际问题,根据网络性能要求逐步增加结构复杂性,直至满足性能要求.著名的网络生长算法有Fahlman提出的瀑流关联^[4];3)与网络生长方法相反,在开始时构造一个含有冗余节点的大规模网络结构,然后在训练过程中逐步删除那些不必要的节点或权值,降低网络的复杂性,提高其泛化能力,最优脑外科算法(optimal brain surgeon, OBS)^[5-6]就是其中一种代表性的算法;4)进化方法,其中,最具代表性的遗传算法是基于生物进化原理的搜索算法,具有很好的鲁棒性和全局搜索能力,非常适用于神经网络结构的优化和调整^[7].

凑试法简单易行,但是由于要凑试若干个候选网络,所以凑试过程繁琐费时,并且需要一定的先前经验来确定网络结构.另一方面,由于网络对初始条

收稿日期:2007-03-22.

基金项目:国家自然科学基金资助项目(60304012,60674066);北京市科技新星计划资助项目(H020821210120).

通讯作者:张颖.zhangying611@163.com.

件、训练参数较敏感且存在局部极小,所以凑试方法往往不易找到适宜的网络结构.网络生长方法在训练过程中逐渐增加隐层神经元的数量,直到满足性能要求为止,这一过程无疑会耗费大量时间,并且随着神经元数量的递增,其计算量也急剧增大.而遗传算法最大的问题是昂贵的计算.相比之下,网络修剪方法具有以下优点:(1)起始时的大规模网络保证能较快地完成训练;(2)降低了对初始条件的敏感性;(3)通过修剪,网络将更适合实际函数并有更好的泛化能力.在修剪技术中,由 Hassibi 和 Stork 提出的最优脑外科算法最负盛名.然而,常规 OBS 算法是通过逐个删除具有最小特征值的权值来实现网络结构修剪的,这大大增加了程序的计算量及运行时间,也使得 OBS 算法在大规模神经网络中的应用受到限制^[8].正是这样,本文提出了一种改进 OBS 算法,实验结果表明,该算法能够获得简洁的网络结构,并且具有更快的收敛速度.

1 OBS 算法

OBS 算法是一种基于 Hessian 矩阵的网络修剪算法.首先,构造误差曲面的一个局部模型,分析权值的扰动所造成的影响.构造这样一个模型结构的出发点是在运行点附近使用 Taylor 级数给出代价函数 ω 的局部逼近,并假设权值参数仅在训练过程收敛之后才被从网络中删除,且包含局部最小或者全局最小的误差曲面是近似“二次的”,因此,可以描述为

$$\omega = (\mathbf{w} + \Delta \mathbf{w})^T \mathbf{H} (\mathbf{w} + \Delta \mathbf{w}) - (\mathbf{w})^T \mathbf{H} \mathbf{w}, \quad (1)$$

$$\mathbf{H} = \frac{\partial^2 \omega(\mathbf{w})}{\partial \mathbf{w}^2}$$

$$\frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \left[\frac{\partial F(\mathbf{w}, \mathbf{x}(n))}{\partial \mathbf{w}} \right] \left[\frac{\partial F(\mathbf{w}, \mathbf{x}(n))}{\partial \mathbf{w}} \right]^T. \quad (2)$$

式中: \mathbf{H} 是 Hessian 矩阵, F 是多层神经网络实现的输入输出映射函数, \mathbf{w} 是权向量, $\Delta \mathbf{w}$ 是权向量增量, \mathbf{x} 为网络的输入样本, N 为训练样本总数, n 为样本的序号.

OBS 的目标是置一个突触权值为零使得式(1)中给出的 ω 的递增增量最小化.令 $w_i(n)$ 表示这个特别的突触权值.这个权值的删除等价于条件:

$$\mathbf{l}_i^T \mathbf{w} + w_i = 0 \quad (3)$$

成立,其中 \mathbf{l}_i 是除了第 i 个元素等于单位 1 之外其他所有元素均为零的单位向量.因此, OBS 的目标可理解为是对权值向量增长变化 $\Delta \mathbf{w}$ 最小化二次型

$\frac{1}{2} \Delta \mathbf{w}^T \mathbf{H} \Delta \mathbf{w}$, 使它满足约束条件 $\mathbf{l}_i^T \mathbf{w} + w_i$ 为零,然

后关于下标 i 求最小化.

这里进行 2 个层次上的最小化.第 1 个最小化是当第 i 个权值向量置零后对仍保留的突触权值向量进行的;第 2 个最小化是对特定被修剪的向量进行的.

为了解决这个约束最优化问题,首先构建一个 Lagrange 算子:

$$S = \frac{1}{2} \Delta \mathbf{w}^T \mathbf{H} \Delta \mathbf{w} - (\mathbf{l}_i^T \mathbf{w} + w_i). \quad (4)$$

式中: λ 是 Lagrange 乘子.然后求 Lagrange 函数 S 对 $\Delta \mathbf{w}$ 的导数,应用式(3)的约束条件,并且利用矩阵的逆,求得权值向量 \mathbf{w} 中的最佳变化:

$$\Delta \mathbf{w} = - \frac{w_i}{[\mathbf{H}^{-1}]_{i,i}} \mathbf{H}^{-1} \mathbf{l}_i. \quad (5)$$

Lagrange 算子 S 对元素 w_i 的相应最优值是

$$S_i = \frac{w_i^2}{2[\mathbf{H}^{-1}]_{i,i}}. \quad (6)$$

式中: \mathbf{H}^{-1} 是 Hessian 矩阵 \mathbf{H} 的逆, $[\mathbf{H}^{-1}]_{i,i}$ 是这个逆矩阵的第 (i, i) 个元素.假设第 i 个突触权值 w_i 被删除,对 \mathbf{w} 进行优化而得到的 Lagrange 算子 S_i 称为 w_i 的显著性.事实上,显著性 S_i 代表由于 w_i 的删除而导致的均方误差中的增长.在 OBS 过程中,相应于最小特征值的权值将被删除,剩余权值将按式(5)进行校正.

2 快速修剪算法

在上述的 OBS 算法中, Hessian 矩阵的计算是一个关键问题. OBS 算法中对 \mathbf{H} 的计算是针对网络中的某一突触权值 w_i 进行的, w_i 对应于 \mathbf{H} 中的第 (i, i) 个元素,对于大规模的神经网络,必然导致 \mathbf{H} 的规模过大,此外,算法对于 S_i 的计算以及对最小显著性的搜索均是针对权值进行的,这些必然导致算法的计算量增大以及运行时间过长^[9-10].针对这些问题,提出了一种快速修剪算法,这种算法针对网络中的隐层神经元 i 计算 $H_{i,i}$, 利用与第 i 个神经元相连的所有 m 个权值的均值 $\overline{w_{ij}}$ 计算 S_i , 从而达到减小计算量,缩短程序运行时间的效果.令

$$\overline{w_{ij}} = \frac{\sum_{j=1}^m w_{ij}}{m}, \quad (7)$$

相应地,式(2)变为

$$H_{i,i} = \frac{\partial^2 \omega(p_{ij})}{\partial p_{ij}^2}$$

$$\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N F(p_{ij}) F(p_{ij}), \quad (8)$$

$$p_{ij} = \sum_{j=1}^m w_{ji} \cdot x_j. \quad (9)$$

式中: p_i 为网络输入输出映射函数 F 的输入, 这种针对某一隐层神经元 i 计算 $H_{i,i}$ 的方法, 在保留了计算所需的必要信息的同时, 减小了 H 矩阵的规模. 此外, 第 i 个神经元的显著性为

$$S_i = \frac{\overline{w_i^2}}{2 [H^{-1}]_{i,i}}, \tag{10}$$

这表明 S_i 的值越大, 网络中的第 i 个神经元对网络的影响越大. 因此, 当 S_i 的值小于某一设定值时, 与其对应的隐层神经元将被删除.

完整的多层神经网络快速修剪算法如下:

- 1) 训练给定多层感知器, 使其收敛于最小均方误差;
- 2) 利用递归公式计算 Hessian 矩阵的逆 H^{-1} ;
- 3) 计算每个隐层神经元的显著性 S_i ;
- 4) 如果显著性 S_i 远小于均方误差, 那么删除相应的神经元 i , 否则, 转第 6) 步;
- 5) 通过应用如下调整, 校正网络中所有的突触权值:

$$w = - \frac{\overline{w_i}}{[H^{-1}]_{i,i}} H^{-1} l_i, \tag{11}$$

转第 2) 步;

- 6) 当不再有神经元被删除时停止计算, 并在该点重新训练网络.

3 仿真实验

在解决实际问题时, 网络的最优结构是一个未知数, 因此在应用中应该使网络在保持良好性能的同时获得尽可能简单的结构. 在仿真实验中, 将 OBS 算法及快速修剪算法应用于活性污泥法污水处理过程建模, 并将获得的相关实验数据进行比较.

由于活性污泥法污水处理过程具有高度的复杂性和非线性, 而神经网络能够根据对象输入/输出的数据直接建立模型, 不需要对象的先验知识及复杂的数学公式推导, 因此使得神经网络可以在建模过程中发挥作用. 本实验选择网络的输入向量为污水调节池的几个重要的进水水质指标, 分别为混合液悬浮固体 (MLSS)、化学需氧量 (COD)、pH、油及氨氮. 其中 MLSS 是指单位体积生化池混合液所含干污泥的重量, 单位为 mg/L , 用来表征活性污泥浓度. COD 是指废水中能被氧化的物质在被化学氧化剂氧化时, 所需要的氧量, 以 mg/L 为单位. 由于它能够综合性地反映废水中所有有机物质的数量, 且分析比较简单, 因此被广泛地应用于废水分析和环境工程上. pH 值反映进水水质的酸碱程度, 油是

进水的油类污染物的含量, 氨氮代表进水中油类污染物的含量. 网络输出向量为通过活性污泥系统处理后的出水 COD 值. 实验所用数据来源于某小型污水处理厂水质化验日报表.

在仿真实验中, 网络采用 5-12-1 的连接方式, 训练样本和检测样本各 100 组, 实验结果相关数据如表 1, 其中运行时间指采用已收敛于最小均方误差的网络进行网络结构修剪及再次训练的时间.

表 1 2 种算法的性能比较

Table 1 Performance of the two algorithms

算法	训练误差	检测误差	优化的网络结构 (权值数)	运行时间
OBS 算法	0.01	0.11	60	12 30
快速修剪算法	0.01	0.07	54 (9 神经元)	4 15

修剪前后的神经网络结构如图 1 所示, 图中虚线表示经过快速修剪算法优化后剔除的冗余神经元及其连接权值.

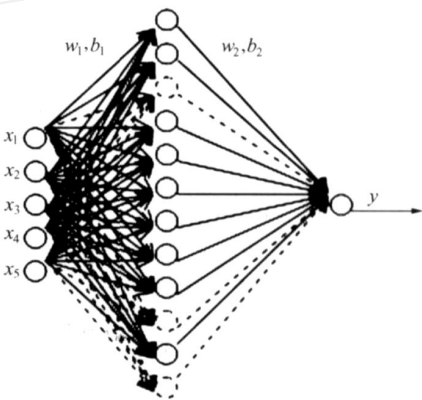


图 1 经过快速修剪算法优化后的网络结构

Fig. 1 The network structure after pruning by the fast unit pruning algorithm

采用 OBS 算法及快速修剪算法修剪后的网络泛化能力分别如图 2、图 3 所示, 图中实线为网络的检测样本的样本输出值, 虚线为网络对检测样本进行在线学习后的实际输出值, 由图可见, 采用快速修剪算法进行优化后网络的实际输出与样本输出拟合效果很好, 保持了网络较好的泛化能力. 实验结果表明, 与 OBS 算法相比, 快速修剪算法可以使网络获得更简单的隐层结构, 同时优化学习时间更短.

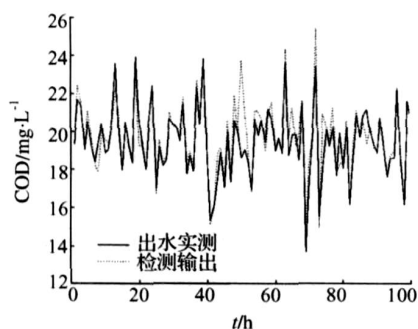


图2 OBS算法检测样本误差

Fig. 2 The training error of OBS

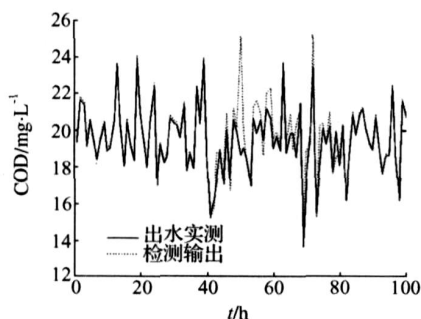


图3 快速修剪算法检测样本误差

Fig. 3 The training error of the fast unit pruning algorithm

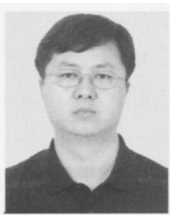
4 结束语

本文提出的改进 OBS 算法,可以通过直接剔除冗余隐层神经元的方式实现神经网络结构自组织设计.实验结果表明,与 OBS 算法相比,快速修剪算法缩短了训练时间,从而使这种快速修剪算法在处理复杂问题时,更具实用性.

参考文献:

- [1]魏海坤,徐嗣鑫,宋文忠.神经网络的泛化理论和泛化方法[J].自动化学报,2001,27(6):806-815.
WEI Haikun, XU Sixin, SONG Wenzhong. Generalization theory and generalization methods for neural networks [J]. Acta Automatica Sinica, 2001, 27(6): 806-815.
- [2]何述东.多层前向神经网络结构的研究进展[J].控制理论与应用,1998,15(3):313-319.
HE Shudong. Survey of architecture for multilayer feed-forward neural networks [J]. Control Theory and Applications, 1998, 15(3): 313-319.
- [3]MOODY J. Prediction risk and architecture selection for neural networks [C]// Statistics to Neural Networks: Theory and Pattern Recognition Applications, NATO ASI Series F. New York, 1994.
- [4]FAHLMAN S E, LEBIERE C. The cascade-correlation learning architecture [C]// Advances in Neural Information Processing Systems. San Mateo, USA, 1990.
- [5]HASSIBI B, STORK D, WOLFF G. Optimal brain surgeon and general network pruning [C]// IEEE International Conference on Neural Networks. Perth, Australia, 1993.
- [6]杨钟瑾,史忠科.快速自顶向下优化神经网络结构的方法[J].系统仿真学报,2005,17(1):162-165.
YANG Zhongjin, SHI Zhongke. Fast approach for optimal brain surgeon [J]. Journal of System Simulation, 2005, 17(1): 162-165.
- [7]李倩,王永县,朱友芹.人工神经网络混合剪枝算法[J].清华大学学报,2005,45(6):831-834.
LI Qian, WANG Yongxian, ZHU Youqin. Hybrid pruning algorithm for artificial neural network training [J]. Journal of Tsinghua University, 2005, 45(6): 831-834.
- [8]JAMES T L. Statistical method of pruning neural networks [C]// International Joint Conference on Neural Networks. Washington, DC, 1999.
- [9]KIERON M. Fast unit selection algorithm for neural network design [C]// 15th International Conference on Pattern Recognition. Southampton, 2000.
- [10]MESSER K, KITTLER J. Choosing an optimal neural network size to aid search through a large image database [C]// Proc British Machine Vision Conference BMVC98. [S.l.], 1998.

作者简介:



乔俊飞,男,1968年生,教授,博士,主要研究方向为复杂过程建模与控制、计算智能与智能优化控制.



张颖,女,1982年生,硕士研究生,主要研究方向为污水处理过程的智能化建模与仿真.