

具有正交化存储模式的双层 神经网络模型研究*

胡北来 黄五群 高成群 陈天嵩

(南开大学物理系, 天津, 300071)

张延忻

(南开大学现代光学研究所, 天津, 300071)

提出了一个具有正交化存储、双层、循环工作的神经网络模型, 该模型具有异联想-自联想能力。用蒙特卡洛模拟研究表明, 此模型的最大存储模式数 M 等于每层的神经元数 N , 而且具有较强的寻址能力。

关键词: 神经网络, 正交化存储, 自联想-异联想能力。

1 引言

目前已建立的人工神经网络模型中^[1~6], 对自联想(Auto-associative)神经网络给予了较多的注意, 而对异联想(Hetero-associative)神经网络缺乏较深入的研究。在 Meir 和 Domany^[7] 提出的多层次前馈模型(简记为 MD 模型)中, 其相互作用矩阵采用了未消除交叠的存储模式, 使得 MD 模型的性能受到限制。

本文提出了一个双层正交化存储神经网络模型, 它具有异-自联想功能(简记为 OPHA 模型)。用蒙特卡洛方法仿真研究表明, 该模型具有很强的异-自联想能力, 对异-自联想能正确识别的最大存储模式数 $M = N$, 且有较强的寻址能力。

2 OPHA 模型

2.1 OPHA 模型的提出

OPHA 模型由两层神经元组成, 每层神经元的个数均为 N 。每个神经元都可能处于兴奋或抑制两种可能的状态, 分别表示为 $S_i^l = +1$ (兴奋状态)或 -1 (抑制状态), 其中 $l=1, 2$ 表示层数, $i=1, 2, \dots, N$ 表示相应层中的神经元序号。同一层的神经元之间无相互作用, 但每一层的每一个神经元都与另外一层的所有神经元相互作用, 然而此相互作用仅是单方向循环进行的。图 1 示出了 OPHA 模型的工作原理, 图中仅画出第一层的一个神经元与第二

* 本文 1990 年 6 月 5 日收到, 修改稿 1991 年 4 月 17 日收到。

• 国家自然科学基金资助项目。

层所有神经元之间的相互作用。

在初始时刻，第一层神经元状态由输入模式确定，第二层神经元系统处于任一初始状

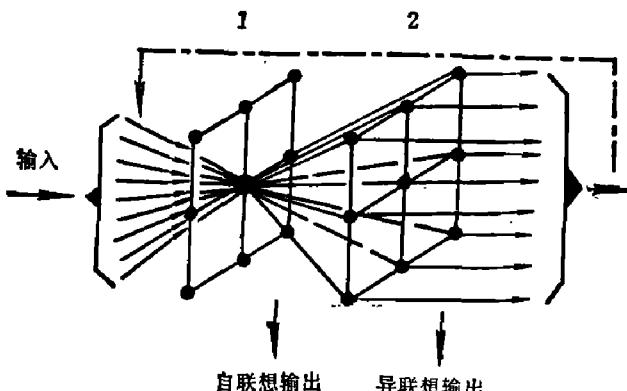


图 1 OPHA 神经网络模型工作原理图

Fig. 1 The schematic diagram of the neural network with OPHA model

态，之后状态随时间的演化是：第二层的每一个神经元都受到第一层所有神经元的作用，该作用由相互作用矩阵 $T^{(1)}$ 来确定。这种作用的总和将决定第二层的每一个神经元的状态；而后，第二层神经元的状态又通过相互作用矩阵 $T^{(2)}$ 作用于第一层的每一个神经元，从而使第一层神经元的状态发生变化，照此循环直至得到稳定的输出模式。

该模型的动力学行为由下式描写：第 l 层中第 i 个神经元处于 S_i^l 的几率为：

$$P(S_i^l) = \theta \beta S_i^l h_i^l / 2 \cosh(\beta S_i^l h_i^l); \quad (1)$$

式(1)中， $l=1, 2$ ； $\beta=1/T$ ， T 为网络系统的温度。 h_i^l 是第 l 层中第 i 个神经元所接收到的由第 l' 层产生的相互作用场，其值由下式给出：

$$h_i^l = \sum_{j=1}^N T_{ij}^{(l)} S_j^l; \quad (2)$$

其中 l' 表示与 l 不同的另一层， $T_{ij}^{(l')}$ 是相互作用矩阵 $T^{(l')}$ 的矩阵元。

当系统的温度 $T=0$ 时，由式(1)、(2)得，

$$\begin{cases} S_i^2(t) = \text{Sgn} \left[\sum_{j=1}^N T_{ij}^{(2)} S_j^1(t) \right] \\ S_i^1(t+1) = \text{Sgn} \left[\sum_{j=1}^N T_{ij}^{(1)} S_j^2(t) \right]; \end{cases} \quad (3)$$

式中 $\text{Sgn}[\dots]$ 为函数符号， t 是 OPHA 网络系统的循环次数， $S^1(t) = [S_1^1(t), S_2^1(t), \dots, S_N^1(t)]$ 和 $S^2(t) = [S_1^2(t), S_2^2(t), \dots, S_N^2(t)]$ 分别表示在第 t 次循环中第一层和第二层神经元的状态。当 $t=1$ 时， $S^1(1)$ 取为系统的输入模式。系统经若干次循环后，达到稳定状态，即 $S^1(t+1)=S^1(t)$ 和 $S^2(t+1)=S^2(t)$ ，将此状态记为 S^{1*} 和 S^{2*} ，分别称之为自联想和异联想的稳定输出模式。

为了说明 OPHA 相互作用矩阵构造的优点，下面先讨论 MD 模型存在的问题。

2.2 MD 模型的缺欠

在 MD 模型^[7]中，层间相互作用矩阵元为

$$J_{ij}^l = \frac{1}{N} \sum_{\mu=1}^M \xi_{\mu j}^{l+1} \xi_{\mu i}^l \quad (4)$$

其中 $\xi_{\mu}^l (\mu=1, 2, \dots, M)$ 是第 l 层的随机存储模式。在识别 S 模式的过程中，MD 模型的第 l 层的神经元状态用 S^l 表示，则第 $l+1$ 层中第 i 个神经元的状态为

$$S_i^{l+1} = \text{Sgn}(h_i^{l+1}) = \text{Sgn} \left(\sum_{j=1}^N J_{ij}^l S_j^l \right). \quad (5)$$

当被识别的模式取为某一个存储模式 ξ_{μ}^l 时，由式(4)、(5)可以得到

$$h_i^{l+1} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \sum_{\mu=1}^M \xi_{\mu i}^{l+1} \xi_{\mu j}^l \xi_{kj}^l = \xi_{ki}^{l+1} (1 + \delta_{ik}^{l,l+1}), \quad (6)$$

其中

$$\delta_{ik}^{l,l+1} = \frac{1}{N} \sum_{\mu \neq k} \sum_{j=1}^N \xi_{\mu i}^{l+1} \xi_{\mu j}^{l+1} \xi_{\mu j}^l \xi_{kj}^l. \quad (7)$$

显然 $\delta_{ik}^{l,l+1}$ 是一个随机数^[8], 其平均值 $\langle \delta_{ik}^{l,l+1} \rangle = 0$, 这里 $\langle \dots \rangle$ 表示对随机存储模式的分布取平均, 其方均值为

$$\langle (\delta_{ik}^{l,l+1})^2 \rangle = (M-1)/N \approx M/N \equiv \alpha. \quad (8)$$

随机数 $\delta_{ik}^{l,l+1}$ 的几率分布是高斯型分布^[8]. 当其绝对值小于 1 时, 由式(6)和式(7)得到第 $l+1$ 层第 i 个神经元的状态为 ξ_{ki}^{l+1} , MD 模型系统得到正确的输出模式; 而当 $\delta_{ik}^{l,l+1}$ 小于 -1 时, MD 模型系统将做出错误的识别. 从式(7)可以看出, $\delta_{ik}^{l,l+1}$ 来自于存储模式之间的交叠, 它限制了系统的存储容量. 因此, 在本文提出的 OPHA 模型中两层均采用了正交化的存储模式, 以便获得较好的性能.

2.3 OPHA 模型的相互作用矩阵

在本文中, 用 $\xi_{\mu}^1 (\mu=1, 2, \dots, M)$ 表示 OPHA 模型的第一层神经网络的存储模式, 用 ξ_{μ}^2 表示与之相应的输出模式. 在第二层中则用 ξ_{μ}^2 表示第二层的存储模式, 而与之相应的输出模式为 ξ_{μ}^1 . 为了做统计研究并与其它模型比较, 将 ξ_{μ}^1 和 ξ_{μ}^2 取为随机模式. 一般说来, M 个 $\xi_{\mu}^l (\mu=1, 2, \dots, M)$ 之间是不正交的. 为了实现正交化存储, 我们采用了正交化投影方法.

正交投影方法是将 ξ_{μ}^1 看成是 N 维空间中的一个矢量, 将第 k 个矢量 ξ_k^1 在由 $\{\xi_m^1, m=1, 2, \dots, k-1\}$ 构成的正交化子空间上投影, 其剩余部分构成第 k 个正交化基矢 ξ_k^{*1} . 由 Gram-Schmidt 正交化方法^[10] 得,

$$\xi_k^{*1} = \xi_k^1 - \sum_{m=1}^{k-1} (\xi_k^1 \cdot \xi_m^{*1}) \xi_m^{*1} / \|\xi_m^{*1}\|, \quad (9)$$

式中, $(\xi_k^1 \cdot \xi_m^{*1})$ 表示 ξ_k^1 和 ξ_m^{*1} 的内积, $\|\dots\|$ 表示矢量的平方模. 同理可得 ξ_{μ}^2 的正交化基矢为

$$\xi_k^{*2} = \xi_k^2 - \sum_{m=1}^{k-1} (\xi_k^2 \cdot \xi_m^{*2}) \xi_m^{*2} / \|\xi_m^{*2}\|. \quad (10)$$

与之相应的正交存储相互作用矩阵的递推关系为:

$$T_m^{(1)} = \begin{cases} T_{m-1}^{(1)} + (\xi_m^2 - T_{m-1}^{(1)} \xi_m^1) (\xi_m^{*1})^T / \|\xi_m^{*1}\|, & \text{若 } \|\dots\| \neq 0; \\ T_{m-1}^{(1)}, & \text{若 } \|\dots\| = 0; \end{cases} \quad (11)$$

$$T_m^{(2)} = \begin{cases} T_{m-1}^{(2)} + (\xi_m^1 - T_{m-1}^{(2)} \xi_m^2) (\xi_m^{*2})^T / \|\xi_m^{*2}\|, & \text{若 } \|\dots\| \neq 0; \\ T_{m-1}^{(2)}, & \text{若 } \|\dots\| = 0. \end{cases} \quad (12)$$

当 $m=M$ 时由上面二式可以得出正交化存储的相互作用矩阵 $T_M^{(1)} \equiv T^{(1)}$ 和 $T_M^{(2)} \equiv T^{(2)}$, 式中 $T_0^{(1)}$ 和 $T_0^{(2)}$ 都可以取值为零或单位矩阵(式(11), (12)推导见附录).

把 $T^{(1)}$ 和 $T^{(2)}$ 代入式(3), 在第一层输出的是自联想模式, 在第二层输出的是异联想模式. 鉴于网络是做循环迭代, 所以它相当于层数无穷的前馈神经网络. 当输入模式为存储模式 ξ_k^l 时, 则

$$h_i^l = \sum_{j=1}^N T_{ij}^{(l)} \xi_{kj}^l = \xi_{ki}^l,$$

将此结果与式(6)比较可见 $\delta_{ik}^{l,l+1}=0$, 也就是说在 OPHA 模型中消去了存储模式之间交叠

引起的噪声,从而提高了存储容量.由于神经元数目为 N , 线性无关的存储模式数 $M \leq N$, 故 OPHA 模型的存储容量为

$$\alpha_c^{\text{OPHA}} = M_{\max}/N = 1. \quad (13)$$

3 数值研究结果

在模型的计算机仿真研究中, 取每层神经元数 $N = 100$, 存储模式数为 M , 在 $M-340$ 机上对模型的异联想和自联想功能进行了仿真研究. 为方便计, 定义一个表征两个模式 S 和 S' 相似程度的量 $q(S, S')$, 称之为 S 与 S' 的交叠, 其值为

$$q(S, S') = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S'_i \cdot S_i. \quad (14)$$

神经网络系统模式识别的正确程度由稳定输出模式与存储模式之间的交叠决定. 自联想及异联想的平均交叠分别由以下二式确定:

$$\langle q \rangle = \begin{cases} \langle q(S^{1*}, \xi_\mu^1) \rangle & (\text{自联想}), \\ \langle q(S^{2*}, \xi_\mu^2) \rangle & (\text{异联想}); \end{cases} \quad (15)$$

式中 $\langle \cdots \rangle$ 表示对随机存储模式分布的平均.

3.1 仿真计算 OPHA 模型的存储容量 α_c^{OPHA}

取 M 个存储模式 ξ_μ^1 及与之一一对应的 ξ_μ^2 分别为第一层存储模式及其相应的输出模式. 取存储模式 ξ_μ^1 中的每一个作为输入模式, 在第二层将得到异联想输出 S^{2*} , 而且发现 $S^{2*} = \xi_\mu^2$. 而在第一层输出中得到自联想输出模式 S^{1*} , 且有 $S^{1*} = \xi_\mu^1$. 只循环一次就得到了正确的结果.

对某一 M 值, 取 1000 个随机模式分成若干组重复上述过程, 结果表明: 当 $M \leq N$ 时, 平均交叠 $\langle q \rangle = 1$; 当 $M > N$ 时, $\langle q \rangle < 1$, 故得到

$$\alpha_c^{\text{OPHA}} = 1. \quad (16)$$

这正是式(13)所预期的理论结果.

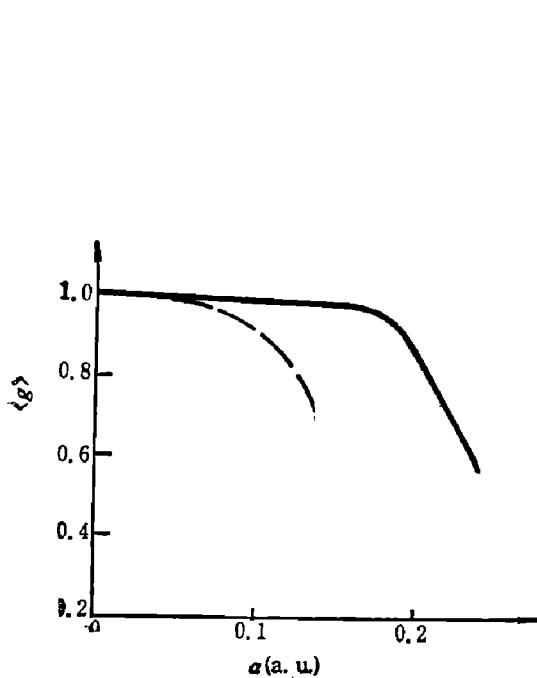
3.2 OPHA 模型网络的寻址能力

为了研究 OPHA 模型网络的寻址能力, 对每一个 $\alpha = M/N$ 的值, 我们取每一个存储模式 ξ_μ^1 , 并且加入 50% 随机噪声, 然后计算输出模式. 结果表明: 经 2—5 次循环, 网络便可给出稳定正确的输出. 我们分别测出了自联想的平均交叠和异联想的平均交叠, 对 1000 个随机模式计算出 $\langle q \rangle \sim \alpha$ 曲线, 如图 2 所示. 图中实线表示自联想的平均交叠曲线, 而异联想的平均交叠曲线完全与前者重合, 这正与公式(11)和(12)中 ξ_μ^2 和 ξ_μ^1 所处的等价位置相吻合. 图 2 中 $\langle q \rangle = 0.99$ 所对应的 α 值(记为 α_M^{OPHA})代表对于含有 50% 噪声的输入模式能正确识别的存储容量, 由图 2 可见:

$$\alpha_M^{\text{OPHA}} = 0.17.$$

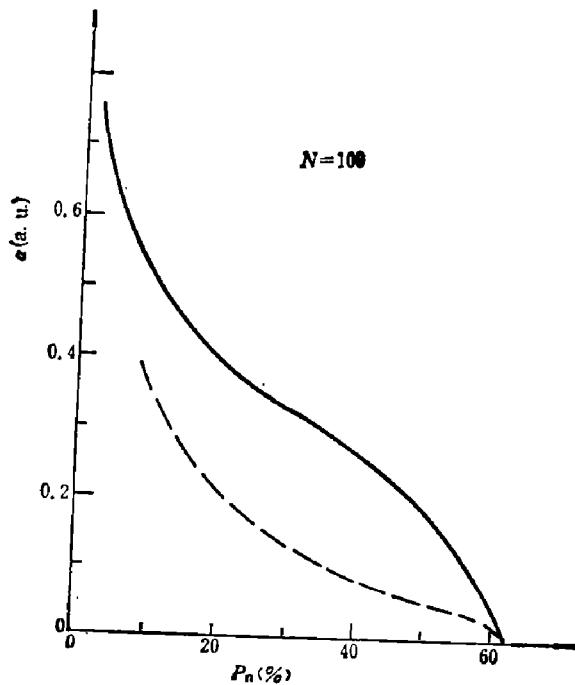
3.3 $\alpha \sim P_n$ 曲线

P_n 是输入模式中所含噪声的比例, 图 3 中的曲线表示当识别后的交叠 $\langle q \rangle = 0.99$ 时所对应的 α 随 P_n 的变化关系. 其中实线是自联想和异联想的结果. 该曲线为实现 OPHA 网络提供了选取参数的重要依据.

图 2 $\langle q \rangle \sim \alpha$ 曲线

实线 ξ_μ^1 和 ξ_μ^2 ——对应时自联想和异联想结果，虚线表示非一一对应结果

Fig. 2 The curves of $\langle q \rangle$ vs α

图 3 $\alpha \sim P_n$ 曲线

实线 ξ_μ^1 和 ξ_μ^2 ——对应时自联想和异联想结果，虚线非一一对应结果

Fig. 3 The curves of α vs P_n

3.4 ξ_μ^1 和 ξ_μ^2 非一一对应情况

以上讨论的都是 ξ_μ^1 与 ξ_μ^2 存在一一对关系时的性质，图 4(a)给出的就是此情况下自联想(第二列 A、B、C 字母)和异联想(第三列 1、2、3 数字)输出模式的一个形象的例子，第一列是含 50% 噪声的输入模式。

对于异联想(特别是在编码过程中)，可能要求非一一对应情况，如图 4(b)所示。在这种情况下，式(12)已不适用，因而 OPHA 系统的第一层只能接收输入信息，在第二层得到异联想的输出，此系统不能循环工作。但是对于非一一对应情况的异联想识别，正如本节 3.1 中说明的， α_c^{OPHA} 仍为 1。在非一一对应情况下， $\langle q \rangle \sim \alpha$ 和 $\alpha \sim P_n$ 两条曲线见图 2 和图 3 中虚线。

综上所述，本文提出的 OPHA 模型具有多层神经网络模型的特征，而且具有异联想和自联想的功能。由于采用了正交化的存储方式，提高了系统的存储容量，使得 $\alpha_c^{OPHA} = 1$ ，即使对含 50% 噪声的识别模式，存储模式数 M 尚能达到 $0.17N$ 。本文还讨论了 ξ_μ^2 和 ξ_μ^1 非一一对应的情况下系统的特点，此时系统只能进行异联想。图 3 给出的 $\alpha \sim P_n$ 曲线为实现 OPHA 神经网络选定参数提供了重要依据。

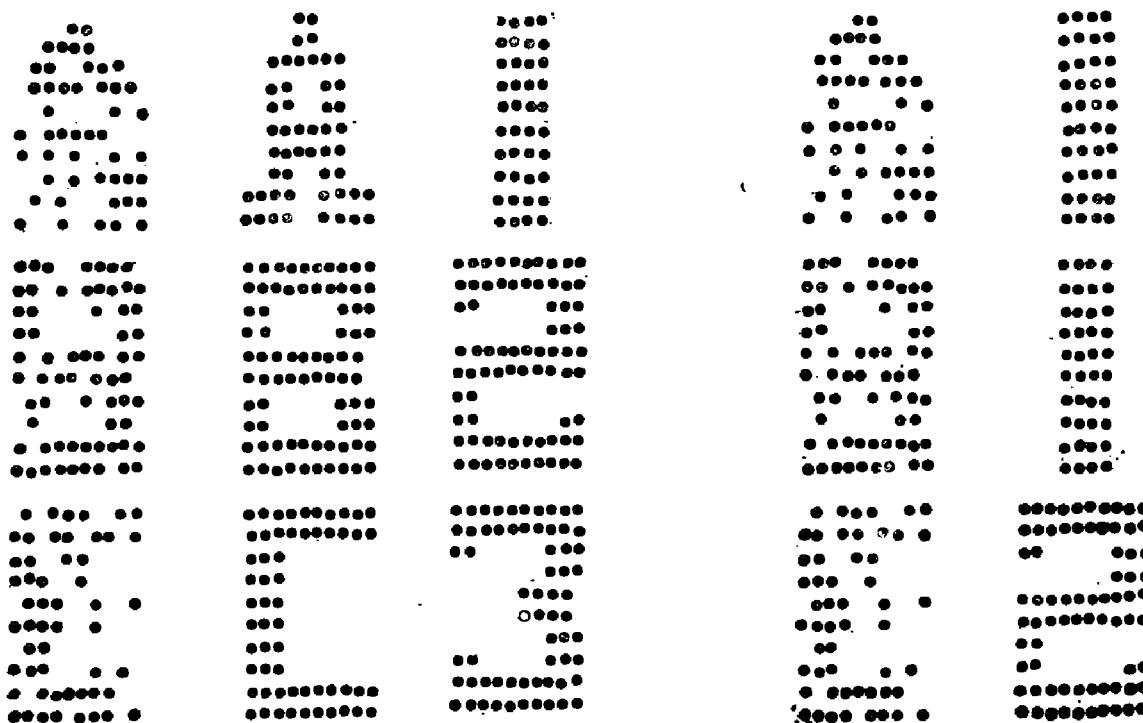


图 4(a) ξ_μ^2 和 ξ_μ^1 一一对应下自联想和异联想结果示意图

Fig. 4(a) The features of the results obtained from the autoassociative and heteroassociative recalls for ξ_μ^2 and ξ_μ^1 corresponding to each other

图 4(b) ξ_μ^2 和 ξ_μ^1 非一一对应下异联想结果示意图

Fig. 4(b) The features of the results obtained from the heteroassociative recall for ξ_μ^2 and ξ_μ^1 not corresponding to each other

附录

由文中式(3)可见, OPHA 系统正确识别的条件可以表示为(当以某一个存储模式 ξ_μ^1 为输入模式时):

$$\xi_\mu^2 = T^{(1)} \xi_\mu^1, \quad (A1)$$

同理,

$$\xi_\mu^1 = T^{(2)} \xi_\mu^2, \quad (\mu = 1, 2, \dots, M) \quad (A2)$$

令 $X = (\xi_1^1, \xi_2^1, \dots, \xi_M^1)$, $Y = (\xi_1^2, \xi_2^2, \dots, \xi_M^2)$, 为 $N \times M$ 矩阵. 则式(A1)、(A2)可简记为

$$X = T^{(2)} Y \quad (A3)$$

$$Y = T^{(1)} X \quad (A4)$$

方程(A4)的解为

$$T^{(1)} = Y X^+, \quad (A5)$$

其中 X^+ 是矩阵 X 的广义逆矩阵. 求解 X^+ 的方法有多种^[10~14], 本文采用如下计算方法.

令 $T_m^{(1)} = Y_m X_m^+$ 为 m 个模式的相互作用矩阵, 并且将 Y_m 表示为 $Y_m = (Y_{m-1}, \xi_m^2)$. 根据 Greville 定理^[11],

$$X_m^+ = \begin{pmatrix} X_{m-1}^+ & (I - \xi_m^1 O_m^T) \\ O_m^T & \end{pmatrix},$$

其中 O_m^T 表示矩阵 O_m 的转置矩阵。

$$O_m = \begin{cases} \frac{(I - X_{m-1}X_{m-1}^+) \xi_m^1}{\|(I - X_{m-1}X_{m-1}^+) \xi_m^1\|}, & \text{当分子不等于零时;} \\ \frac{(X_{m-1}^+)^T X_{m-1}^+ \xi_m^1}{1 + \|X_{m-1}^+ \xi_m^1\|}, & \text{其它情况;} \end{cases} \quad (A6)$$

式中 I 为单位矩阵。将 X_m^+ 乘以 Y_m 得：

$$T_m^{(1)} = Y_{m-1} X_{m-1}^+ + (\xi_m^2 - Y_{m-1} X_{m-1}^+ \xi_m^1) O_m^T = T_{m-1}^{(1)} + (\xi_m^2 - T_{m-1}^{(1)} \xi_m^1) O_m^T. \quad (A7)$$

对于正交化基矢 ξ_μ^{*l} 计算可得文中式(11)。对方程(A3)做类似计算则得文中式(12)。显然 $T^{(1)} = T_M^{(1)}$, $T^{(2)} = T_M^{(2)}$ 。其中取 $T_0^{(1)} = 0$ 或 $T_0^{(1)} = I$ (对 $T_0^{(2)}$ 亦然)都能得到正确的结果。

参 考 文 献

- 1 Hopfield J Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A., (1982); **79**: 2254
- 2 Hebb D O. *The organization of Behavior*, Wiley, New York, 1949
- 3 Little W A. *Math. Biosci.*, (1974); **19**: 101
Little W A, Shaw G L. *Math. Biosci.*, (1978); **39**: 281
- 4 Domany E. *J. Stat. Phys.*, (1988); **51**: 743
- 5 Amit D J, Gutfreund H, Sompolinsky H. *Ann. Phys.*, (1987); **173**: 30
- 6 Tomany E, Meir, Kinzel W. *Europhys. Lett.*, (1986); **2**: 175
- 7 Meir R, Domany E. *Phys. Rev.*, (1988); **A37**: 608, **A37**: 2660
- 8 Kinzel W, *Phys Z. B60*(1985); **B60**: 205
- 9 James T. *Cushing, Applied Analytical Mathematics for Phys. Sci.*, John Wiley and Sons Inc., New York, 1975. 19
- 10 Alpert A. *Regression and the Moore-Penrose Pseudoinverse*, Academic, New York, 1972
- 11 Golub G H, Van Loan C F. *Matrix Computations*, Johns Hopkins Press, Baltimore, 1983
- 12 Pyle L D. *J. Assoc. Comput. Mach.*, (1964); **11**: 422 Rust B, Burrus W R. *Schneberger C Commun.* (1966), ACM9: 381
- 13 Greville TNE. *SIAM Rev.*, (1960); **2**: 15

ON A MODEL OF TWO-LAYER NEURAL NETWORK WITH ORTHOGONALIZED STORAGE*

HU BEILAI, HUANG WUQUNS GAO CHENGQUN CHEN TIANLUN

(*Department of Physics, Nankai University, Tianjin 300071, China*)

ZHANG YANXIN

(*Institute of Modern Optics, Nankai University, Tianjin 300071, China*)

A model of two-layer neural network with orthogonalized storage is proposed. A system based on the model will have a capability of both auto-associative and hetero-associative memories. Monte Carlo simulation shows that the maximum number of stored key patterns with the model can be up to N (the number of neurons in each layer of the network) and a good content-addressability is achieved.

Key words: neural network, orthogonalized storage, auto-associated and hetero-associated capabilities.

* The project supported by the National Natural Science Foundation of China.