

自组织神经树用于判别氟化物非晶态形成条件

蔡煜东 许伟杰 陈念貽
(中国科学院上海冶金研究所, 上海 200050)

关键词: 氟化物, 非晶态, 人工神经网络

1 人工神经网络——自组织神经树模型

人工神经网络 (ANN) 是八十年代中期迅速兴起的一门非线性科学. 它力图模拟人脑的一些基本特性, 如自适应性、自组织性、容错性等, 已在模式识别、数据处理及自动化控制等领域得到了初步应用, 取得了相当好的效果^[1,2].

1993 年, Tao-Li 等提出了自组织神经树网络. 它是一个多层树状网络 (见图 1), 每个输入节点与所有神经树的节点 (神经元) 通过权 W 相联系, 实现对输入信号的非线性降维映射. 映射中保持拓扑不变性, 即把拓扑意义下相似的输入 (即在高维空间中距离较近的输入向量) 映射到相同子树的节点 (即属于同一子树的节点) 上. 自组织神经树目前已被应用于模式识别、图像压缩、语音处理等问题中, 取得了优于传统方法的效果^[3].

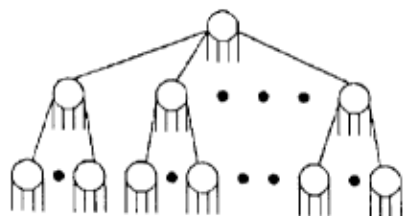


图 1 典型的神经树结构

Fig.1 A typical neural tree architecture

自组织神经树在被用来进行正确分类之前需要经过一个学习过程: 网络权根据输入的训练样本进行自组织、自适应, 依次收敛于某个 (或几个) 子树, 即收敛到样本空间内需划分的子集的中心. 经过训练后, 神经树具有了对学习样本的记忆、联想的能力.

神经树的学习算法 (本文选择 OSSU^[3] 算法, 即 Ordered Search Subtree Update) 如下:

设样本特征数 (输入节点个数) 为 N , 神经树的节点数 (不含树根) 为 k , 深度 (深度 = 网络层数 - 1) 为 D_p .

Step 1: 随机给定网络初始权.

$$0 < W_{ij} < 1, i=0,1,\dots,N-1; j=0,1,\dots,k-1$$

Step 2: 赋当前层数 $Lev=1$

Step 3: 输入一个新样本

1994-05-03 收到初稿, 1994-08-11 收到修改稿. 联系人: 蔡煜东.

$$\chi = [\chi_0, \chi_1, \dots, \chi_{N-1}]^T$$

从第一层逐层迭代, 寻找 χ 到当前层的最近节点 j^* .

表 1 三元系氟化物训练数据集

Table 1 The training data set of trinary fluoride

R_1/R_F	R_2/R_F	R_3/R_F	X_1/X_F	X_2/X_F	X_3/X_F	Node	Class
0.588235	0.727941	0.992647	0.384615	0.358947	0.230769	26	1
0.588235	0.845588	0.992647	0.384615	0.307692	0.230769	12	1
0.588235	0.727941	0.845588	0.384615	0.358947	0.307692	27	1
0.683823	0.727941	0.992647	0.307692	0.358974	0.230769	25	1
0.367647	0.683823	0.727941	0.384615	0.307692	0.25641	0	1
0.367647	0.683823	0.992647	0.384615	0.307692	0.230769	20	1
0.470588	0.588235	0.933823	0.461538	0.358974	0.410256	14	1
0.544117	0.639705	0.992647	0.410256	0.307692	0.223076	13	1
0.441176	0.727941	0.992647	0.243589	0.358974	0.230769	11	1
0.683823	0.727941	0.992647	0.307692	0.358974	0.230769	24	1
0.595588	0.683823	0.992647	0.333333	0.307692	0.230769	9	1
0.544117	0.713235	0.992647	0.410256	0.435897	0.230769	10	1
0.441176	0.698529	0.727941	0.243589	0.230769	0.358974	1	1
0.441176	0.727941	0.977941	0.243589	0.358974	0.205128	8	1
0.588235	0.992647	0.992647	0.384615	0.230769	0.230769	6	1
0.588235	0.830882	0.830882	0.384615	0.25641	0.25641	19	1
0.588235	0.727941	0.992647	0.384615	0.25641	0.230769	21	1
0.441176	0.698529	1.088235	0.243589	0.230769	0.205128	23	2
0.477941	0.698529	0.977941	0.307692	0.230769	0.205128	22	2
0.441176	0.477941	0.698529	0.243589	0.307692	0.230769	15	2
0.441176	0.477941	0.727941	0.243589	0.307692	0.25641	2	2
0.367647	0.477941	0.698529	0.384615	0.307692	0.230769	16	2
0.477941	0.698529	0.727941	0.307692	0.230769	0.25641	18	2
0.698529	0.977941	1.088235	0.230769	0.205128	0.205128	7	2
0.367647	0.441176	0.977941	0.384615	0.243589	0.205128	17	2
0.147058	0.698529	0.977941	0.51282	0.230769	0.205128	4	2
0.30147	0.698529	0.977941	0.487179	0.230769	0.205128	5	2
0.367647	0.441176	0.698529	0.384615	0.243589	0.230769	3	2

初始: j^* 为树根节点

FOR $k=1$ To Lev Do

$$d_j(t) = \sum (\chi_i - W_{ij}(t))^2$$

$$d_{j^*}(t) = \min_j \{ d_j(t) \}$$

$j \in \mu E_{j^*}(t)$; $\mu E_{j^*}(t)$ 为节点 j^* 的所有子树节点.

Step 4: 调整网络权

$$W_{ij}(t+1) = W_{ij}(t) + \alpha(t)(\chi_i - W_{ij}(t)), j \in N E_{j^*}(t)$$

$$W_{ij}(t+1) = W_{ij}(t), j \notin N E_{j^*}(t)$$

其中 $i=0,1,\dots,N-1$; $0 < \alpha(t) < 1$, $\alpha(t)$ 是增益函数, 随时间递减; $N E_{j^*}(t)$ 为节点 j^* 的所有子树节点 (包括 j^*).

Step 5: 转 Step 3.

当所有样本输入一遍后, 满足 $Lev=Dp$, 学习结束, 否则 $Lev=Lev+1$, 进入下一轮学习. 有关算法的详细性质和特点可参阅 [3].

2 自组织神经树应用于三元系氟化物非晶态形成的判别

研究表明^[4]: 对于三元体系氟化物, 三元系中的各阳离子半径 R_i 与 F 的半径 R_F 之比 R_i/R_F , 以及各个阳离子的电负性 X_i 与 F 的电负性 X_F 之比 X_i/X_F 是决定其形成非晶态的重要因素.

首先将样本分为两类: 第一类, 形成非晶态; 第二类, 不形成非晶态. 随机选取 28 个样本作为神经树的“学习”教材, 以其特征变量 (R_1/R_F 、 R_2/R_F 、 R_3/R_F 、 X_1/X_F 、 X_2/X_F 、 X_3/X_F) 作为神经树的输入. 神经树为 2 层 3 节点 (1→2) 结构. 经过学习, 神经树能较为正确地划分这些样本. 0 节点代表第一类; 1 节点代表第二类, 建立了化学键参数与非晶态之间的复杂对应关系, 见表 1.

为了进一步考验所建立的模型, 将未参加训练的 3 个样本作为“未知”样本, 由已掌握了“知识”的神经树对其进行判别, 根据其最近距离输出节点 (即最大相似点) 的类别决定其类别. 由表 2 可见, 判别结果与实际情况完全一致.

表 2 三元系氟化物预测数据

Table 2 The predicted data set of trinary fluoride

R_1/R_F	R_2/R_F	R_3/R_F	X_1/X_F	X_2/X_F	X_3/X_F	Node	Class (predicted)	Class (actual)
0.588235	0.830882	0.992647	0.384615	0.25641	0.230769	8	1	1
0.367647	0.727941	0.992647	0.384615	0.358974	0.230769	27	1	1
0.367647	0.441176	1.242647	0.384615	0.243589	0.192307	22	2	2
0.441176	0.727941	0.992647	0.243589	0.25641	0.230769	23	2	2

3 结果与讨论

本文运用自组织神经树探讨氟化物非晶态形成条件, 取得了令人满意的结果. 此外, 神经树方法同一般多因子判别法相比, 有如下优点:

1) 容错能力强. 神经树模型中, 知识信息分布存储于各个单元中, 个别输入信号误差变大不会引起识别错误. 即用一个不完整或模糊的信息, 神经树可联想出存贮在记忆中的某个完整、清晰的图像来, 因此不失一般性. 本研究中将每个未知样本的第 2 个输入信号 (x_2) 各增加 0.01 作为“构造样本”进行识别, 它们与原来样本的识别结果比较见表 3.

表 3 个别输入信号误差变大对网络性能的影响

Table 3 Influence on the performance of the network by single neuron damage

Closest node*	Predicted class*	Closest node	Predicted class
8	1	8	1
27	1	27	1
22	2	22	2
23	2	23	2

* means constructing samples.

2) 学习、判别速度快. 自组织神经树在进行训练、识别时仅需作少量的加法和乘法. 有鉴于此, 随着人工神经网络理论的进一步发展, 可望开辟化合物非晶态形成条件判别的新途径.

参 考 文 献

- 1 Hecht-Nielsen R. "Theory of the Backpropagation Neural Network", Int. J. Conf. on Neural Network, Washington D. C. June 1989
- 2 Lippmann R P. "An Introduction to Computing with Nerual Network", IEEE ASSP magazine, 1987, 4-22
- 3 Li T, Fang L, Li K Q -Q. Hierarchical Classification and Vector Quantization with Neural Network Trees. *Neurcomputing*, Vol 5 (2&3), 1993
- 4 骆梅青, 程兆年等. "模式识别 - 化学键参数在氟化物非晶态形成的判别条件的应用", 第三届全国计算机化学学术报告会论文集, pp. 102-103, 1990
- 5 Frank I E, Kowalski B R. *Anal. Chem.*, 1982, 54:232

An Application of Self-organization Neural Network Tree to the Discrimination of Amorphous State of Trinary Fluoride

Cai Yudong Xu Weijie Chen Nianyi
(*Shanghai Intitute of Metallurgy, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 200050*)

Abstract In this paper, the self-organization neural network tree is presented to discriminate the amorphous state of trinary fluoride on the basis of some chemical bond parameters. And the computer intelligence expert system is built. The successful rate is high. The results indicates that the performance of the neural network method is good, and therefore it might be referred as an effective supplementary technique for the discrimination of amorphous state of compounds.

Keywords: Fluoride, Amorphous state, Neural network