

·学科进展·

计算智能的研究与思考

董 聪 郭晓华

(清华大学土木工程系,北京 100084;中国科学院模式识别国家重点实验室,北京 100080)

[摘 要] 通过对近 20 年来基于连接机制和基于进化机制的人工智能形式体系所取得的成就和存在的问题进行了系统的回顾,就目前引起学术界广泛关注的一些热点问题进行了剖析,探讨了这些热点问题产生的根源,并提出了一些新的研究思路和解决方案。在此基础上,对该领域的未来发展趋势进行了预测。

[关键词] 人工智能,连接机制,进化机制,广义遗传算法,模拟退火算法

引 言

人工智能(Artificial Intelligence, AI),广义的讲就是利用计算机模拟和再现人类的某些智能行为。从方法论的角度,AI大致可分为3种基本类型:(1)以符号操作为基本特征,以演绎方法为逻辑主体,从抽象层次模拟和再现人类某些智能行为的符号机制(Symbolism)^[1];(2)以大量神经元的相互连接和作用为基本特征,以不完全归纳方法为逻辑主体,从神经元的连接关系和作用机制层次模拟和再现人类某些智能行为的连接机制(Connectionism)^[2];(3)以遗传操作为基本特征,以物竞天择为逻辑主体,从基因族的发展和演化层次探寻人类某些智能行为发展和演化规律的进化机制(Evolutionism)^[3-5]。基于连接机制和基于进化机制的人工智能形式体系通常合称为计算智能(Computational Intelligence, CI)形式体系。

1 连接机制和进化机制的模型与方法

1.1 作为通用函数逼近器的人工神经网络

用一元函数的复合表示及逼近多元函数是数学中的一个重要问题。Hilbert(1900)猜想,不是所有的多元连续函数都能用一元连续函数的复合表示。这个猜想被著名数学家 Arnold 和 Kolmogonov 证伪。Kolmogonov(1957)证明:定义在紧致子集上的多元连续函数可用有限一元连续函数的复合精确表示。

Kolmogonov 的工作为多层前向网络映射能力数学证明奠定了基础。

精确表示通常过于复杂,人工神经网络的研究者们选择了近似描述的道路。由精确表示转向近似描述带来了许多意想不到的问题,最典型的当属网络的泛化问题和网络对于离散点集的全局最优逼近问题。Hornik 证明^[6]:在一个相当宽的范围内,3层前向网络具有以任意精度逼近定义在紧致子集上的任意非线性连续或分段连续函数的能力。Hornik 的证明预示着:(1)多层前向网络可作为通用函数逼近器使用。(2)任何一个模糊逻辑系统都可以用多层前向网络表达,且其中的隶属关系可通过自学习的方式确定。90年代,与 Hornik 等人的证明并行展开的是不断增多的工程应用。于是,函数逼近论中从未出现过的一个概念开始在前向网络的应用中频繁地出现,这个概念就是泛化(Generalization)。泛化问题的出现使人们认识到,多层前向网络映射能力的数学证明和网络的实际学习过程之间存在一些根本性的差异^[7-8]。董聪认为,经典函数逼近论研究的是被逼近对象(无论它是一个元素 x ,还是一个子集 μ)的完整特性已知时的函数逼近问题,而在多层前向网络的应用中,多数情况下被逼近对象的特性是未知的。因此,经典函数逼近论的研究所基于的数学空间和多层前向网络的实际逼近过程所基于的数学空间的特性是不同的,它们是两类不同性质的逼

国家自然科学基金资助项目。
本文于 1999 年 5 月 20 日收到。

近问题,具有完全不同的逼近机制。从认知的角度讲,所谓学习,就是对未知现象或未知规律的归纳和发现。Kolmogorov 研究的是精确表示而非逼近问题,Kolmogorov 只是改变了研究对象的表达形式,但未改变它所具有的特性,因此不存在泛化问题。Hornik 等人研究的是经典函数逼近论框架下的函数逼近问题。在经典函数逼近论中,虽然新的逼近表达式中的元素和被逼近对象中的有关元素的特性不同,但由于被逼近对象的完整特性是已知的,逼近过程在整个定义域内实现无延拓现象发生,因此也不存在所谓的泛化问题。从数学的角度讲,前向网络的泛化问题是在被逼近对象的完整特性未知的条件下,由有限维离散点集间的映射关系向无限维连续点集间的映射关系延拓时产生的。同样,由于延拓关系的出现,网络对于离散点集的全局最优逼近问题才变得重要和有意义。1997年,董聪证明,在有 N 个学习样本的条件下,至多具有 N 个隐层节点的 3 层前向网络便可以实现对学习样本的零误差描述^[7]。也就是说,多层前向网络的隐节点数存在明确的上限,不可能通过无限制扩充隐节点的方式改进网络的性能。次年,又提出了网络拓扑结构学习的通用算法^[9],证明多层前向网络的拓扑结构不仅可以学习,而且有可能借助于迭代算法,发现网络隐节点数的下限。对于著名的 2—7 位 Parity Mating 问题,采用通用算法压缩后的网络结构为 $N-N-1$ 。即当学习样本以指数方式增长时,压缩后的网络结构,其隐节点的增长方式是线性的,不仅人们原先担心的 NP 问题未出现,而且网络的简化程度完全出乎人们原先的意料。

1.2 网络拓扑结构学习算法及其生物学原理

Shatz 对发育中的大脑进行了深入的研究,发现成熟的神经连接形式的出现在于轴突有选择地收缩及长出新的分枝的重新安排。轴突在其靶结构(靶位)内伸到不同地址(靶址),然后再通过竞争逐步消除初始选址的错误。视觉系统中的靶位对应于人工神经网络中的隐层,而靶位内的靶址对应于隐层中隐节点的位置。Shatz 研究的是视网膜节细胞的轴突在外侧膝状核内发育及成型的过程,同样的过程也发生在外侧膝状核内神经元的轴突在初级视觉皮层(亦称 V1 区)内的发育成型中^[10-12]。

我们将 Shatz 等人的发现以计算机模拟程序的方式再现出来,提出了多层前向网络中跨层连接的概念和网络拓扑结构学习的通用算法^[9]。我们还发现,最大限度地压缩网络的拓扑结构是实现网络泛

化功能的有效途径。

由于著名心理学家 Hebb 在 40 年代初期的杰出工作,科学家们已在下述问题上达成共识:动物的某些学习和记忆过程可通过突触特性的变化加以解释。70 年代以来,现代生物学的研究成果进一步揭示,动物的学习和记忆过程不仅表现为突触的变化,而且突出地表现为神经细胞内部构造的变化,即人工神经网络中节点函数的特化。生物系统发育过程中神经细胞内部构造的变化已被哈佛医学院 Selkoe 的研究结果所证实。

重新审视一下如式(1)表示的含有 n 个输入、1 个输出、 M 个隐节点的 3 层前向网络

$$f(X) \sim \sum_{m=1}^M \beta_m h_m(Z_m) = \sum_{m=1}^M \beta_m h_m\left(\sum_{i=1}^n \alpha_{im} x_i\right) \quad (1)$$

如果把隐层的节点输出看作是经过变换后的广义坐标的话,则 3 层前向网络对离散点集的最佳逼近,其实质就是选择最合适的广义坐标 $h_m(Z_m)$ 。从式(1)可以看出,广义坐标的形成依赖于输入层到隐层的连接权矩阵 α_{im} 及隐层节点函数 h_m 的特定选择。 α_{im} 是无级可调的,因此得出结论,广义坐标的特性主要取决于隐层节点函数的特定选择。

Selkoe 证实,真实的生物系统确实存在调整神经细胞内部构造以适应环境变化的内在机制。上文证明,从数学上讲,多层前向网络对离散点集的最佳逼近能力主要取决于隐层节点函数的特定选择。

生物系统中,存在的必有其合理的地方。这种信仰促使我们向生物系统学习,并进而创立了多层前向网络拓扑学习的通用算法。

1.3 模拟退火算法和遗传算法的物理及生物基础

目前有 2 种随机优化算法非常流行,即 Metropolis 提出的模拟退火算法(Simulated Annealing, SA)^[13]和 Holland 提出的遗传算法^[3]。SA 模拟的是金属材料加温后的退火过程,GA 模拟的是生物的自然进化过程。从模拟对象看,两者几乎没有任何共同之处,但从算法本身的形式结构看,两者则极其相似。SA 借助于产生函数(Generation Function)确保状态空间各点的概率可达性,通过接受算子(Acceptation Operator)模拟平衡态,通过接受算子的定向变化保证算法迭代进程的方向性。GA 则通过交换算子(Crossover Operator)和突变算子(Mutation Operator)的协同作用确保状态空间各点的概率可达性,通过选择算子(Selection Operator)的作用保证算法迭代进程的方向性。

退火是金属材料热处理的一种方法,其作用是

使材料的成份更均匀,细化晶粒、增加韧性。因此,退火本身不存在全局最优化问题。SA将组合优化问题中的状态定义为相格,将各状态的函数值定义为相格所对应的内能,将每次抽样所获得的微粒(微观状态)按照 Boltzmann 统计分布进行取舍,并将留下的微粒向对应的相格中投放。虚拟温度(Boltzmann 常数与温度归并为一体)定义为系统中所有微粒所含内能的平均值。虚拟温度的定义方式和 Boltzmann 统计分布的引入,其目的就是模拟热平衡状态的形成过程。通过控制虚拟温度的逐步降低,进一步模拟热平衡状态的定向转移过程。因此,实际上 SA 模拟的是热平衡状态的形成及定向转移过程。

SA 和真实的退火过程之间有明显的差异:(1)真实的退火过程中通常伴随有相变,即有限状态的集合会发生变化。作为对比,组合优化问题中的状态集合是恒定不变的。(2)真实的退火过程中没有平衡态,只有一系列拟平衡态的渐进推进。平衡态的出现意味着退火过程的终结。从热力学的角度讲,在不发生相变的条件下,热平衡状态的定向转移只是使系统各微观状态的内能所服从的随机分布的形态(概率密度函数的形态)发生定向变化,并不能产生新的状态——Boltzmann 分布中,微观状态内能的最大值是 $+\infty$,最小值是 0,这一结果不会随退火过程的进行而改变。因此,SA 解决的是大量抽样中系统平均内能(或峰值状态)的最小化问题,并不是单个状态的最小化问题,而后者才是全局优化方法寻找的目标。

同样,自然进化过程本身也不存在全局最优化问题。Jacob 认为^[14],进化就像是修补匠,它只能从当时所能得到的材料中,有选择地进行调整(使生物体适应环境),其能力受到以前的决定所限制。不仅如此,每个特定的能力看起来都像一个优美的设计,但实际上,它也许不能同更大一些的系统很好地整合在一起,并且有可能同系统的整体布局不相匹配。也说是说,进化的产物都是分阶段局部优化的结果,因此,不可能从单纯模仿生物进化过程发现解决全局优化问题的诀窍。

关于 GA 和 SA 全局优化能力的证明,目前基本上是将算法的迭代过程假设成一个遍历的 Markov 过程,然后证明遍历的 Markov 过程以概率 1 收敛于全局最优解。可以证明,由于样本数是有限的,GA 和 SA 的迭代过程不是一个严格的 Markov 过程。退一步,假设 GA 和 SA 的迭代过程确实是一个遍历的

Markov 过程,可以证明,GA 和 SA 的迭代过程收敛于其极限分布,而不是单个状态的最小点^[11]。

从逻辑上讲,一种算法要想具备实现全局最优化的功能,它只需满足两个条件:第一,具有实现局部最优化的能力。第二,具有从一个局部最优状态向下一个更好的局部最优状态定向转移的能力。

从生物进化的角度讲,生物系统的演化从根本上说是动态的,对于每一个偶然的形态或环境上的变化,生物体皆用已经进化出来的一系列特征去应付生存考验,在此之前并没有一个经过内省的有意识的筹划。换句话说,进化的产物都是分阶段局部优化的结果,要实现全局最优,必须附加一种类似人工选择的定向进化机制。

正是在这样一种思想的指导下,我们创立了广义遗传算法(Generalized Genetic Algorithm, GGA)^[5,10,11]。GGA 屏弃了包括 GA 和 SA 在内的随机优化方法普遍采用的遍历搜索策略,转而采用定向演化模式。从数学上讲,定向演化模式不要求算法的迭代过程是一个遍历的 Markov 过程,GGA 优于 GA 和 SA 的数学原因在于,为实现全局最优,GGA 的实际搜索域只是后者的一个有限子域^[11]。关于 GGA 的全局收敛性,我们从理论和实验两个方面进行过系统的证明^[10,15]。关于 GGA 的生物原理,下文将做简要的说明。

1.4 广义遗传算法的生物学原理

在基因操作上,广义遗传算法借鉴了 Morgan 的基因理论。在进化思想上,广义遗传算法采用了 Eldridge 与 Gould 的间断平衡理论,同时融合了 Mayr 边缘物种形成理论的一些思想。

Morgan 的基因理论认为:(1)基因是遗传物质的基本单位;(2)基因位于细胞的染色体上;(3)基因在染色体上排列为直线;(4)同源染色体配对期间,两条染色体单体之间会发生交叉现象;(5)两条染色体单体交叉时,部分基因可能发生交换和重组;(6)基因突变在空间上是随机发生的;(7)同一染色体上的基因之间可能存在连锁现象。

(1)–(6)作为事实直接引入了广义遗传算法的操作程序,而(7)则是算法执行过程中出现的必然现象。我们发现,基因连锁的程度通常会随着进化过程的进行逐步强化。因此,可以推测,连锁现象本身就是生物进化的产物,基因连锁有利于维持物种的生存和稳定。

现代古生物学发现:(1)几乎所有的进化演变都集中在物种形成初期,即小的创始者种群通常

具有更快的进化速率。(2)物种形成过程结束后,就进入一段比较漫长的相对停滞期。以上述发现为基础,美国古生物学家 Eldridge 与 Gould 在 70 年代创立了关于生物进化的间断平衡理论(The Punctuated Equilibrium Theory)。该理论认为,物种的演化以平缓变化的停滞期为主,其间偶尔被骤变的进化模式所打断。间断平衡理论突破了 Darwin 进化论的单一渐变模式,认为渐变模式和骤变模式的交替作用才真正反映了进化过程的本质。广义遗传算法中,间断平衡点就是非线性进化进程中的分岔点。仿真实验表明,间断平衡现象是广义遗传算法执行过程中出现的必然现象。

Morgan 发现的基因连锁现象和 Mayr 发现的染色体间的内聚约束力表达了同样的观念,即变异在空间上不可能是均匀的。由于变异和突变之间有时存在耦联关系,有理由推测,突变在空间上可能也是不均匀的。从逻辑上讲,突变在空间上的不均匀性必然导致定向突变的存在。

新 Darwin 主义学说认为,突变以恒定的速率发生,这一速率与突变的后果无关。本文将证明,生物大分子进化改变速率相对恒定目前只是一个有待证实的假说,未必是一个不争的事实。历史上,由表 1 (注:表 1 中数字表示各种生物和人的细胞色素 c 所不同的氨基酸数目)中的数据绘制的线性图像开始使人们相信,每一种蛋白质的进化速率都是相对恒定的。然而,当我们重新审视表 1 的时候,突然间意识到,由这些数据作出的推论隐含有严重的逻辑错误。事实上,如果表中的生物均由人类直接退化而来,这些数据确实证明了每一种蛋白质的退化速率都是相对恒定的。但是,众所周知,表中的生物不是由人类退化而来的,酵母菌或马也不可能是人类最临近的祖先。从数理逻辑的角度讲,两两比较,差异不会因选谁为基准而有所改变。但两个以上的物种进行比较,或两个物种之间在进化史上还存在过其他物种的话,则由于基因突变和基因交换的可逆性,比较的结果常常会随选择不同的基准点而改变(表 2)。

在作遗传连锁图的时候,现代分子生物学家就已经发现,在多点交换的情况下,基因重组的数目可能不同于基因交换的次数。因此,分子生物学家同样应该意识到,基因突变和基因交换的可逆性,使得基因改变的数目可能不同于基因突变的次数。换句话说,由于基因突变和基因交换的可逆性,选择不同的物种为基准点进行比较,可能会得出不同的结论。

从数理逻辑的角度讲,要证明生物大分子的进化改变速率是相对恒定的,必须按自然进化顺序,在亲缘关系树的每一个分权点,采用逐步累加的方式计算氨基酸或核酸的变化数,由此得出的结论才真正可靠。这是一项浩大而艰苦的工作,但这项工作的展开和深入无疑将带动和推进一系列相关学科的发展和进步,尤其是对研究人类的起源和演化具有极其重要的意义。本文认为,生物大分子的进化改变速率相对恒定可能是一个事实,也可能不是,这一结论还需要更系统的检验。

表 1 各种生物的细胞色素 c 的氨基酸的比较

生物名称	氨基酸差别	生物名称	氨基酸差别
黑猩猩	0	金枪鱼	21
猕猴	1	沙 鱼	23
袋 鼠	10	天蚕蛾	31
豹	11	小 麦	35
马	12	链孢霉	43
鸡	13	酵母菌	44
响尾蛇	14		

表 2 基准不同而导致的差异(进化顺序 A→B→C)

物种	基因型	基因差别 (基准 A)	基因差别 (基准 C)	基因差别 (累加式)
A	11111000	0	2	0
B	11101000	1	3	1
C	11010000	2	0	4

从仿真实验中发现:如果禁止基因交换,由于基因突变的可逆性,在幸存下来的个体中,基因改变的数目有时低于、甚至远低于基因突变的次数。如果允许基因交换,则问题通常无定论。

综前所述可推测,连锁现象本身也是生物进化的产物,基因连锁的程度通常会随着进化过程的进行逐步强化。换句话说,高等生物的基因比低等生物的基因、或后期出现的控制基因比早期出现的控制基因之间,更易发生基因连锁。由此可进而推测:在幸存下来的物种中,按自然进化顺序,在亲缘关系树的每一个分权点,采用逐步累加的方式计算得到的氨基酸或核酸的改变速度,会随着时间的推移或进化程度的提高而放慢。

广义遗传算法屏弃了新 Darwin 主义学说对突变作用的看法,相信选择、定向交换和定向突变的协同作用是实现快速进化的合理方式。广义遗传算法首次将隔离机制和结果反馈引入操作程序,并通过它对选择、交换和突变的工作方式进行自适应调节。广义遗传算法中,所谓新物种的形成过程,就是新局部最优状态的形成过程,隔离机制就是禁止参数空

间中相隔较远的群落进行交配。隔离机制的作用是保证多局部最优状态的同步形成,也就是确保进化过程的并行化。

GGA 在香港青马大桥传感器群最优布点设计方面的成功应用表明^[14,15], GGA 是高效的,具有广阔的应用潜力。采用 GGA,我们从理论上解决了结构系统的损伤识别和定位这一长期以来悬而未决的难题^[16]。GGA 的下一个成功应用领域可能在生物信息学方面。

2 未来发展之预测

在即将到来的 21 世纪,计算智能研究的下述几个领域会受到特别的关注:

(1)人们清醒地认识到,揭示大脑智能之谜的道路比十几年前设想的要漫长得多。大脑的一些特性,如容错性、鲁棒性等有其内在的、尚未被揭示和深入了解的生物机制,并不必然为目前已有的这类人工神经网络模型所拥有。

(2)个性化的倾向越来越浓,目的性变得日益明确。一方面,工具主义者不再将自己禁锢于生物学约束之中,而仅将生物学的发现看作是开拓视野的一种途径;另一方面,以探索智能形成机制为目标的 AI 研究者,会越来越强调生物学约束的重要性。新的生物学发现会越来越多地作为原始素材被用于构建新的人工神经网络和遗传算法模型,即 AI 研究者会将自己的努力更多地用于建立新的范式,而不是一味地证明旧有范式的合理性。

(3)人工神经网络和遗传算法的应用领域会越来越宽,最成功的应用领域估计会在生物信息学领域和各类智能诊断系统的研制方面。同时,数学证明将结合具体的算法有目的、有针对性地进行。

(4)人们意识到,大脑相当复杂,逻辑思维和形象思维可能具有同等重要的地位。因此,具有归纳和演绎双重功能的混合型逻辑系统的运行机制会受到广泛的重视。

参 考 文 献

- [1] 石纯一, 黄昌宁, 王家钦. 人工智能原理. 北京: 清华大学出版社, 1995.
- [2] Rumelhart D E, Hinton G E, Williams R J. Learning Representation by Backpropagation Errors. *Nature*, 1986, **323**(6188): 533—536.
- [3] Holland J H. *Adaptation in Natural and Artificial Systems*. MIT Press, 1992.
- [4] Bui T N, Moon B R. Genetic Algorithm and Graph Partitioning. *IEEE Trans. on Computers*, 1996, **45**(7): 841—855.
- [5] 董聪. 广义遗传算法. *大自然探索*, 1998, **17**(1): 33—37.
- [6] Honik K. Approximation Capabilities of Multi-layer Feedforward Networks. *Neural Networks*, 1991, **4**: 551—557.
- [7] 董聪. 前向网络全局最优化问题研究. *中国科学基金*, (1): 23—29.
- [8] 董聪. 多层前向网络的逼近与泛化机制. *控制与决策*, 1998, **13** (增刊): 413—417.
- [9] 董聪. 多层前向网络的逼近机理与拓扑结构学习方法. *通信学报*, 1998, **19**(3): 29—34.
- [10] 董聪, 郭晓华. 广义遗传算法的逻辑结构及全局收敛性的证明. *计算机科学*, 1998, **25**(5): 37—42.
- [11] 董聪, 郭晓华. 广义遗传算法的数学结构. *中国科学基金*, 1999, (2): 77—80.
- [12] 董聪. 大脑、知觉模型和计算机模拟. *科技导报*, 1997, (7): 7—10.
- [13] Kirkpatrick S. Optimization by Simulated Annealing. *Quantitative Studies. J. Statis. Phys.*, 1984, **34**: 975—986.
- [14] Jacob F. *The Possible and the Actual*. University of Washington Press, Seattle, 1982.
- [15] 李虎军. 桥梁诊断与遗传算法. *科学时报*, 1999年4月26日.
- [16] 董聪, 郭晓华. 基于知识的结构故障诊断理论. *计算机科学*, 1999, **26**(12).

A RESEARCH AND THOUGHT ON COMPUTATIONAL INTELLIGENCE

Dong Cong Guo Xiaohua

(Tsinghua University, Beijing 100084; The State Key Laboratory of Pattern Recognition, CAS, Beijing 100080)

Abstract Some great achievements have been made in the field of artificial intelligence based on the connectionism and evolutionism in the past two decades, but a few of questions have existed, about which a survey is made in the present paper. A deep study and exploration is also made on the focus questions which have been interested by scientists in the world. The origins of these focus questions are discovered, and some solving methods are suggested. Based on above works, a trend prediction about the future development of artificial intelligence is made.

Key words artificial intelligence, connectionism, evolutionism, generalized genetic algorithm, simulated annealing algorithm