

几种神经网络经典模型综述^①

黄东瑞^{②*} 毛克彪^{③**} 郭中华^{*} 徐乐园^{*} 胡泽民^{*} 赵 瑞^{*}

(^{*} 宁夏大学物理与电子电气工程学院 银川 750021)

(^{**} 中国农业科学院农业资源与农业区划研究所 北京 100081)

摘 要 近年来深度学习在众多领域都有突出表现并展现出巨大应用潜力。神经网络模型是深度学习的重要载体,因此有必要对其进行深入分析。然而神经网络模型发展至今,呈现出种类多样化、应用专有化等特点,例如有用于目标检测的 YOLO 系列模型、机器翻译的 Transformer 系列模型等。本文试图通过对几种主要神经网络经典模型的剖析,找到一条了解深度学习的高效路径。本文首先对深度学习的发展进行概述;然后分别对卷积神经网络(CNN)、循环神经网络(RNN)、生成对抗网络(GAN)、图神经网络(GNN)从模型介绍、原理分析、网络训练、模型改进方面进行详细阐述;最后对上述神经网络模型进行总结并对深度学习未来发展进行展望。

关键词 深度学习;卷积神经网络(CNN);循环神经网络(RNN);生成对抗网络(GAN);图神经网络(GNN)

0 引 言

深度学习是机器学习的重要分支,近年来受到众多行业的普遍关注。如今,深度学习已经在图像分类、自然语言识别、语音识别、语义分割等多个领域得到广泛的应用并且产生了令人满意的效果,甚至在某些方面的表现已经超过人类。深度学习之所以能够发挥如此强大的作用,与数据的海量增长、硬件算力的不断提升、算法的持续更新是密不可分的。

神经网络模型作为深度学习的重要载体为深度学习的快速发展提供了良好的条件。人工神经网络受到动物神经网络系统的启发可对大量数据进行线性学习,而后引入激活函数增强其非线性表达能力,进而结合反向传播算法使其对图像、语音等数据具有强大的学习能力。随着数字化网络化进程的不断加快,图像、语音、文字等数据量的爆发式增长为人工神经网络提供了海量的可学习数据。中央处理器

(central processing unit, CPU)、图形处理器(graphics processing unit, GPU)、时间处理单元(time processing unit, TPU)、现场可编程门阵列(field-programmable gate array, FPGA)等硬件设备计算能力的快速增长使得神经网络模型可实现对大量数据的高效计算。随机梯度下降(stochastic gradient descent, SGD)、Momentum、自适应梯度下降(adaptive gradient descent, AdaGrad)、均方根传播(root mean square propagation, RMSProp)等算法的不断涌现使得神经网络模型表现出更加优异的性能。因此,神经网络模型逐渐可以解决现实世界中许多复杂的问题,更靠近真正意义上的人工智能。

现有深度学习综述文献多是以单个神经网络或单一领域进行综述,对深度学习领域的其他经典模型、应用领域少有提及。由于神经网络经典模型是大量变体模型的基础,因此本综述对神经网络经典模型进行较为全面、详尽的阐述并梳理出了各经典

① 宁夏自治区科技创新团队柔性引进人才(2021RXTDLX14)和中央级公益性科研院所基本科研业务费专项资金(1610132020014)资助项目。

② 男,1990年生,硕士生;研究方向:遥感大数据;E-mail:hdr3324491072022@163.com。

③ 通信作者,E-mail:maokebiao@126.com。

(收稿日期:2022-11-07)

模型的内在联系,旨在为初入深度学习领域的研究人员了解神经网络经典模型提供一条高效的路径。

1 发展概述

1943 年,MP 模型^[1]被首次提出,表明对人工神经网络的研究正式拉开序幕。1949 年,具有重大历史意义的无监督学习方法——赫布(Hebb)规则的提出,成为发展神经网络研究的坚实基础。20 世纪

50 年代末,一种类似于人类学习过程的算法——感知器的产生对人工神经网络的发展具有无可替代的重大意义。1958 年,最简单的双层人工神经网络被正式提出。但在 1969 年,人们发现感知器(Perceptron)无法解决非线性分类问题。因此从 20 世纪 70 年代开始的近 20 年里,人工神经网络的研究几乎未取得任何实质性进展,使其进入了第 1 个低谷期(图 1)。

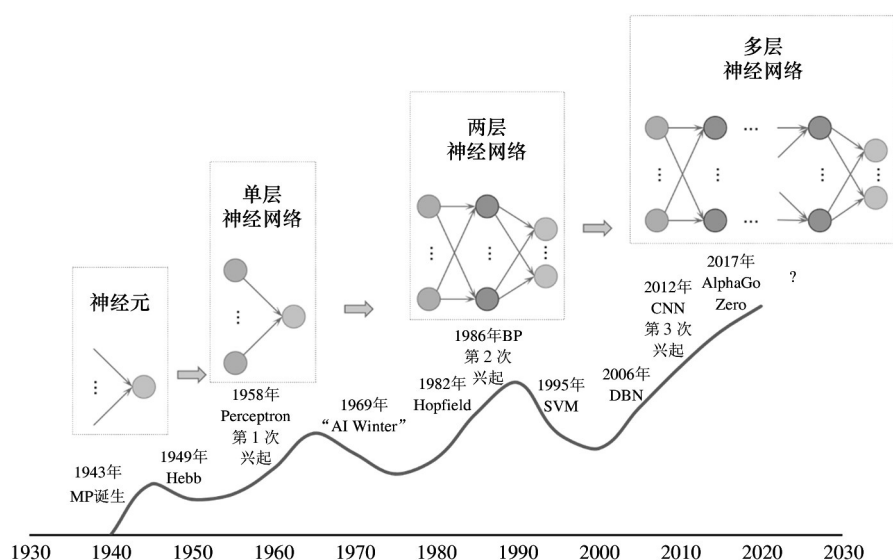


图 1 深度学习发展历程

1982 年,一种具有存储功能的循环神经网络——Hopfield 神经网络^[2]被首次提出,但其易陷入局部极小点的问题一直未得到很好的解决,因此该网络并未受到足够的重视。直到 1986 年,反向传播(back propagation, BP)算法^[3]的提出使得线性不可分问题得到了有效的缓解,学术界再度对人工神经网络产生极大的兴趣。但受当时硬件算力水平的影响,梯度消失问题会随神经网络规模的增大而产生,严重影响了 BP 算法的发展。另外 20 世纪 90 年代中期,人们提出了一类与人工神经网络原理截然不同的算法——浅层机器学习,使得机器学习问题得到了较好的解决。因此对深度学习的研究再一次陷入低谷。

2006 年,深度学习^[4]的概念被正式提出,人们通过无监督学习正向传播与有监督学习反向传播相结合的策略有效地缓解了梯度消失问题。学术界和工业界对深度学习方法的提出反应非常剧烈,先是

以众多世界知名高校为首的科研团队对其进行研究,随后许多企业也在深度学习领域进行了部署。2012 年,神经网络模型 AlexNet^[5]在 ImageNet 竞赛(ILSVRC)中以错误率 15% 的佳绩一举夺得该年度冠军。其中,ReLU 激活函数和 GPU 的使用分别在缓解梯度消失问题和提高硬件算力问题上起到了重要作用。2016 年,在李世石和 AlphaGo^[6]的比赛中,李世石以 1:4 不敌 AlphaGo,并且 AlphaGo 又在后来的多场人机围棋比赛中完胜人类对手,深度学习一时间备受关注。2017 年,AlphaGo Zero^[7]被提出,并以 100:0 完胜此前的 AlphaGo。同年,深度学习在无人驾驶、艺术、医疗、金融等领域得到了广泛的应用。

2 卷积神经网络

卷积神经网络(convolutional neural network,

CNN)是前馈神经网络的一类特殊模型,也是深度学习算法中使用较为广泛的一类神经网络模型^[8],如图2所示。此类神经网络的局部连接、权值共享^[9]特点是受到动物视觉神经网络系统的启发而产生

的,有效增强了模型的鲁棒性,降低了网络的计算复杂度。卷积神经网络在自然语言处理、语音分析和图像识别等领域使用十分广泛并且取得了显著的成果。

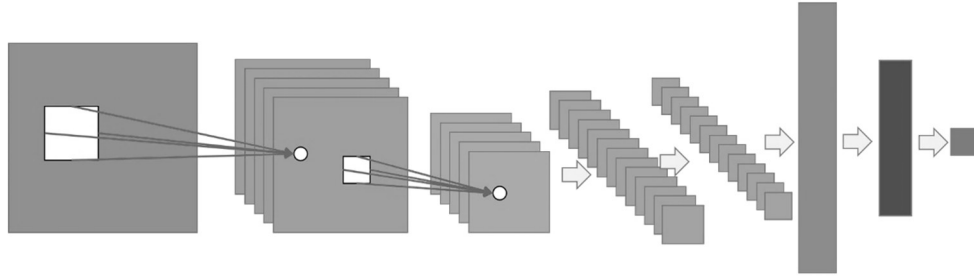


图2 卷积神经网络示意图

2.1 模型介绍

卷积神经网络中的“卷积”一词是由 LeCun 等人^[10]在对其网络结构进行介绍时提出的。为识别手写体数字,LeCun 等人^[10]于 1998 年开发了名为 LeNet-5 的卷积神经网络。卷积层 + 池化层 + 卷积层 + 池化层 + 全连接层 + 全连接层 + 输出层是 LeNet-5 的网络结构,LeNet-5 网络规模并不大,但是全连接层、卷积层、池化层等基本模块是后续各类卷积神经网络的重要组成部分,其网络结构的排列方式也对后来的卷积神经网络架构产生了一定的影响。

2.2 原理分析

在全连接神经网络中,若第 k 层有 M_k 个神经元,第 $k-1$ 层有 M_{k-1} 个神经元,则连接边有 $M_k \times M_{k-1}$ 个,即权值矩阵包括 $M_k \times M_{k-1}$ 个元素。当 M_k 和 M_{k-1} 都很大时,权值矩阵的元素数量剧增,网络训练的效率骤然降低。若采用卷积来代替全连接,第 l 层的净输入 $z^{(l)}$ 主要为第 $l-1$ 层输出值 $a^{(l-1)}$ 和卷积核 $w^{(l)} \in \mathbb{R}^K$ 的卷积,即:

$$z^{(l)} = w^{(l)} \otimes a^{(l-1)} + b^{(l)} \quad (1)$$

其中卷积核 $w^{(l)} \in \mathbb{R}^K$ 为可学习的权值向量, $b^{(l)} \in \mathbb{R}$ 为可学习的偏置。卷积神经网络的优点有:局部连接和权值共享方法有效降低了权值矩阵所含元素数量,同时卷积核在提取数据信息时受数据位置平移的影响明显减小,使得网络的泛化能力显著增强;池化运算进一步降低网络参数量,在减少网络计算量的同时更降低了输入数据位置变化对网

络的影响,有效提升了网络的鲁棒性;相较于传统机器学习,该网络无需进行复杂的特征工程,并且网络的输入数据可以是高维的。

2.3 网络训练

卷积神经网络通常是由输入层、卷积层、激活层、池化层、全连接层、输出层组合而成。整个网络的运行过程为:原始数据由输入层输入网络,卷积层提取输入数据特征得到特征图,池化层对其进行池化采样,实现了对特征图的降维操作。特征图经由激活函数映射,为网络引入非线性特征,增强网络的表达能力。全连接层采用线性特征映射进行信息汇总,汇总信息通过输出层输出结果,用于解决分类、回归等机器学习问题。前向传播和反向传播是一般卷积神经网络的 2 个训练阶段。具体训练过程如图 3 所示。

卷积神经网络的一般训练过程为:(1)初始化网络参数;(2)输入数据由隐藏层处理后,经前向传播得到输出值;(3)得到实际值和输出值的差值;(4)在差值大于阈值时,求得网络各参数对于总误差的梯度,并参考梯度的大小对相应参数进行调整;(5)返回步骤(2)继续训练,直到差值不大于阈值时,网络训练过程结束。

2.4 模型改进

卷积神经网络也有其不足之处:输入数据的尺寸必须一致,否则将难以进行训练;该网络无记忆、存储功能,对视频、语音、文本等序列数据处理能力较差;当网络的规模不断增大时模型极易发生梯度

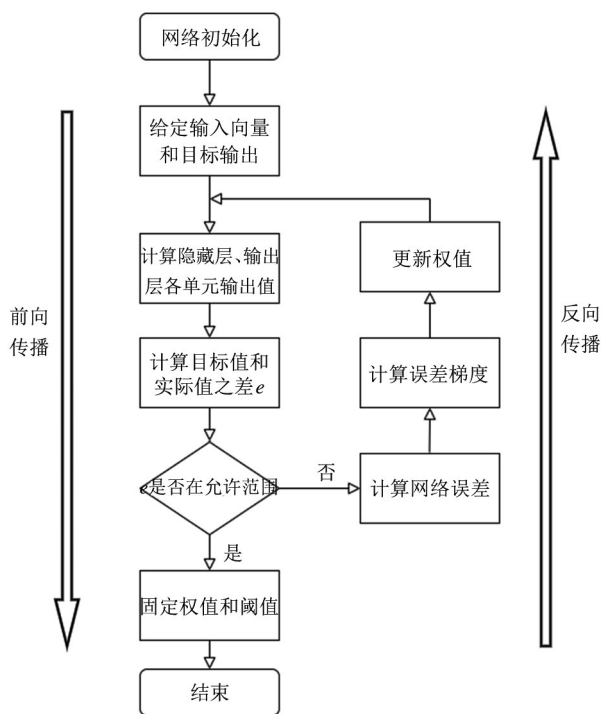


图3 卷积神经网络训练流程图

消失等问题。当然,随着卷积神经网络的发展,不断涌现出诸多优秀的改进模型。AlexNet 于 2012 年所提出的网络架构,如图 4 所示。该模型在 ILSVRC-2012 大赛图像分类任务中,以前 5 错误率 15.3% 的优异成绩夺得冠军,并且远超错误率为 26.2% 的第 2 名。该模型的成功应用使人们对 CNN 乃至深度学习产生了强烈的兴趣。

该网络架构比 LeNet-5 略复杂一些,有 5 个卷积层和 3 个全连接层,在第 1、2、5 个卷积层有最大池化层紧随其后,用来降低输入数据维度、提高模型鲁棒性。使用 ReLU 激活函数进一步增强了网络非线性表达能力,有效加快了网络训练速度、抑制梯度消失问题。在硬件上使用 2 块 GTX580 GPU 大幅提升了网络的计算速度。该项研究还提出了一系列行之有效的神经网络编写技巧,例如提出了局部响应归一化来提高网络准确率增强模型的泛化能力、采

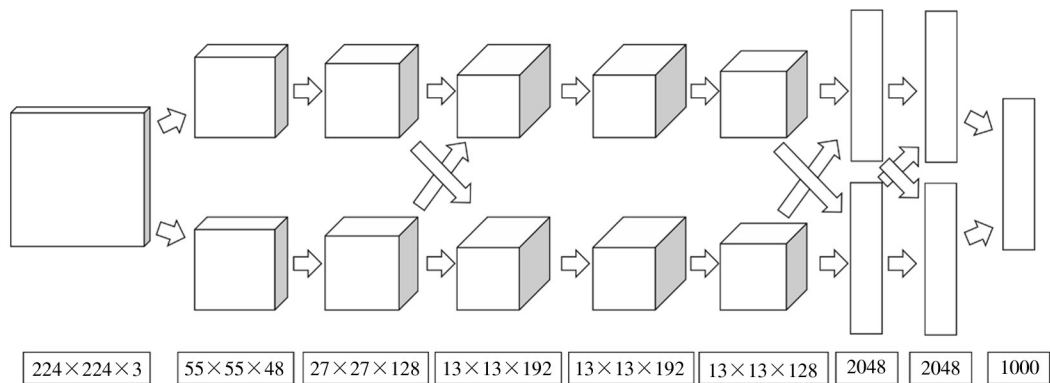


图4 AlexNet 结构示意图

用了数据增强方法显著扩充数据集、使用了 Dropout^[11]打破神经元间的联合依赖性来共同抑制网络过拟合。相比于 LeNet-5,其准确率得到了进一步提升。除了 AlexNet 还有 ZFNet (Zeiler&Fergus network)^[12]、VGG (visual geometry group)^[13]、GoogLeNet^[14]、残差网络 (residual network, ResNet)^[15]等改进模型。相关内容如表 1 所示,其模型详细内容可参考文献[16]。

3 循环神经网络

循环神经网络 (recurrent neural network, RNN)

是递归神经网络中的一类特殊模型,该模型节点均采用链式连接,而且沿着序列的演进方向进行递归。该网络的记忆功能可有效地将历史信息与当前信息进行综合处理。一般神经网络都是同时对输入数据进行处理,无法高效地处理具有序列特征的数据。RNN 网络结构非常适合处理序列数据,可从序列输入数据中提取出有效的特征信息。RNN 在时序分析、自然语言处理、机器翻译以及语音识别等领域都有着非凡的表现。

3.1 模型介绍

为解决语音处理问题,Elman^[17]于 1990 年开发了 Elman 神经网络,该网络也是首个全连接循环神

表 1 卷积神经网络改进模型对照表

改进模型名称	具体改进方法	改进模型效果
ZFNet	将特征图进行反卷积可视化	增强网络可解释性 有效提高网络训练效率
VGG	用 3×3 卷积核替换 5×5 或者 7×7 的卷积核	证明更深的网络能更好地提取数据特征
GoogLeNet	使用 Inception 模块化结构 引入 1×1 卷积核 将全连接层改换为全局平均池化	改善模型的扩展和修改问题 降低数据特征维度 减少模型计算成本
ResNet	使用模块化结构 采用 Shortcut 方式 引入 BN 层 增加网络深度	实现组块的简单堆叠 缓解网络梯度消失问题 加快训练速度 增强网络收敛稳定性 增强特征提取能力

神经网络。为使 Elman 神经网络具有记忆功能,该网络在隐藏层中多增加了一个延时模块——承接层。该网络显著的特点是具有局部记忆功能和局部反馈连接。Elman 神经网络为循环神经网络发展提供了一个良好的基础,后来又开发出了长短期记忆网络(long short-term memory network, LSTM)、门控循环单元(gated recurrent unit, GRU)等优秀的改进模型。

循环神经网络示意图如图 5 所示,右侧是左侧的展开图。循环神经网络是序列从左到右的一个过程,可看作是循环神经网络的发展模式。 I 代表输入值, t 是当前时刻, $t-1$ 是上一时刻, $t+1$ 是下一时刻。 O 代表输出值。这表明隐藏层的值 H_t 综合了当前的输入值 I_t 和前一时刻隐藏层状态 H_{t-1} 的信息。

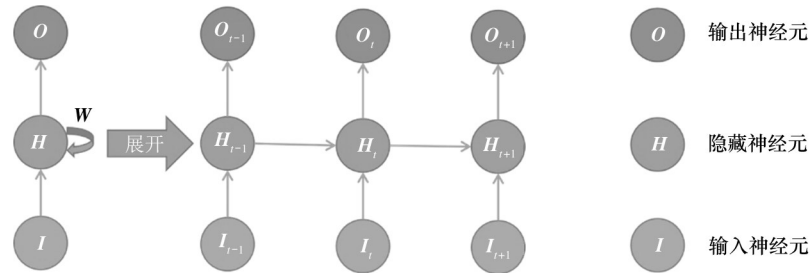


图 5 循环神经网络示意图

3.2 原理分析

简单循环神经网络在时刻 t 的更新公式为

$$z_t = \mathbf{U}\mathbf{H}_{t-1} + \mathbf{w}\mathbf{I}_t + \mathbf{b} \quad (2)$$

$$\mathbf{H}_t = f(z_t) \quad (3)$$

其中 z_t 为隐藏层的净输入, $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{D \times D}$ 为状态-状态权值矩阵, $\mathbf{w} \in \mathbb{R}^{D \times M}$ 为状态-输入权值矩阵, $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^D$ 为偏置向量, $f(\cdot)$ 是非线性激活函数。式(2)和式(3)也经常直接写为

$$\mathbf{H}_t = f(\mathbf{U}\mathbf{H}_{t-1} + \mathbf{w}\mathbf{I}_t + \mathbf{b}) \quad (4)$$

循环神经网络的优点为:理论上不限制序列输

入数据长度;模型形状具有很好的稳定性;计算考虑了历史信息,具有记忆功能;权值随时间共享。

3.3 网络训练

循环神经网络一般包括输入层、隐藏层、承接层和输出层。整个网络的运行过程为:序列数据由输入层传入网络,隐藏层对数据进行信息提取、降维、非线性映射等操作,所获得信息由承接层将其进行延时操作与下一时刻的输入值共同输入网络参与下一时刻数据处理,沿序列演进方向如此往复行进。输出层输出的信息必将是当前时刻和之前所有历史输入值的综合信息,从而使循环神经网络具有记忆

功能。前向传播和随时间反向传播是一般循环神经网络的 2 个训练阶段。循环神经网络的一般训练过程为:(1)初始化网络参数;(2)输入数据由隐藏层处理后,经前向传播得到输出值,同时将输出值传入承接层与下一时刻数据再次输入网络进行数据处理,沿序列演进方向如此往复行进;(3)计算输出值与实际值之间的差值;(4)当误差大于阈值时,求得网络各参数对于总误差的梯度,并参考梯度的大小对各个参数进行调整;(5)返回步骤(2)继续训练,直到误差不大于阈值时,网络训练过程结束。

3.4 模型改进

循环神经网络也有其不足之处:计算速度慢;难

以获取长期历史信息;无法考虑当前状态与未来输入信息之间的联系;易出现梯度消失等问题。随着循环神经网络的发展,研究人员开发出大量优秀的改良模型。LSTM 首先是由 Hochreiter 和 Schmidhuber^[18]于 1997 年提出的网络构架,后经 Graves 改良与推广,如今已被广泛的应用于语音识别、机器翻译等领域。由于其引入“门”的概念,使其拥有优异的序列数据学习能力,为后续 RNN 模型改进提供了明确的方向。其模型结构如图 6 所示。

相较于之前的 RNN 网络结构,该模型由遗忘门 + 输入门 + 输出门的门控单元组合而成。该网络结构理论上可处理任意长序列数据,可遗忘无效信息

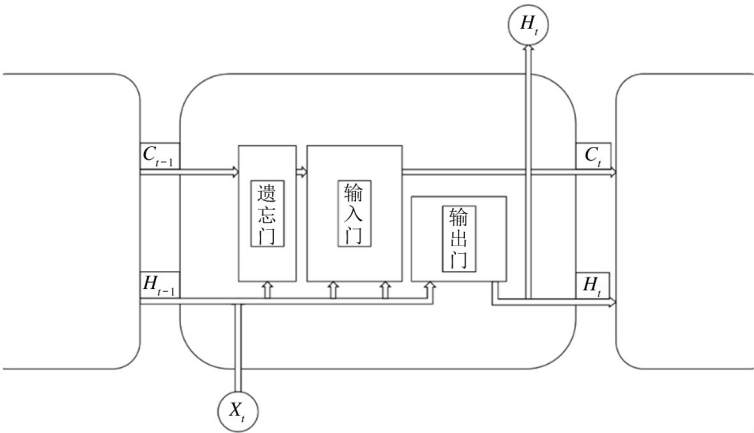


图 6 LSTM 结构示意图

实现上下文有效信息存储和更新,进而使长短期记忆有机结合,有效缓解了长期依赖、梯度消失等问题。除了 LSTM 还有深度门限 LSTM^[19]、简单循环单元(simple recurrent unit, SRU)^[20]、双向循环神经

网络(bidirectional recurrent neural network, BRNN)^[21]、GRU^[22]、GRU-D (GRU with decay)^[23]等改进模型。相关内容如表 2 所示,其模型详细内容可参考文献[24]。

表 2 循环神经网络改进模型对照表

改进模型名称	具体改进方法	改进模型效果
深度门限 LSTM	在 LSTM 基础上增加深度门	使得上下层之间具有线性依赖提高模型性能
SRU	去除 LSTM 循环结构的依赖关系	提高模型计算速度的同时保持强大的表达能力 节约计算资源和训练时间
BRNN	采用双向循环结构	解决 RNN 无法考虑当前状态与未来任意输入信息之间的联系问题 增强模型有效性和鲁棒性
GRU	将输入门和遗忘门耦合为更新门 由重置门和更新门组成	简化网络模型结构 对序列数据跨度较大的依赖关系有更好的捕捉能力
GRU-D	在 GRU 的基础上增加衰变机制	有效处理缺失值并改善预测结果

4 生成对抗网络

生成对抗网络 (generative adversarial network, GAN) 在结构上采用隐性对抗来替代数学上的显性表示, 并且该网络模型训练的可收敛性在数学上已经得到了一定程度证明, 模型结构如图 7 所示。近

年来, 该神经网络已成为无监督学习中最具前景的方法之一。GAN 可在不设置任何前提条件的情况下生成 real-like 样本, 有效摆脱了神经网络模型对有监督学习方式的依赖, 降低了模型训练成本。GAN 最直接的应用是数据生成, 同时在图像翻译、视频生成和自然语言处理等领域都有应用。

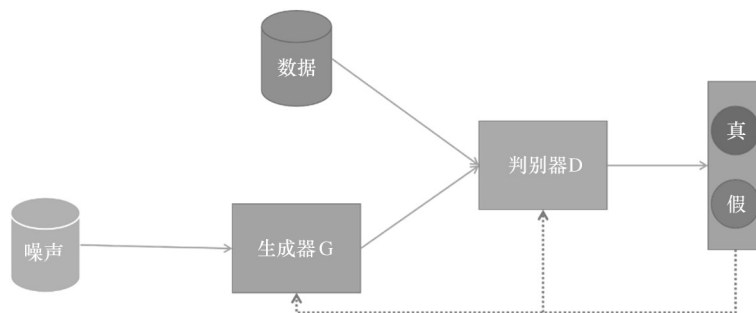


图 7 生成对抗网络示意图

4.1 模型介绍

Goodfellow 等人^[25]于 2014 年开发出了以对抗方式进行模型训练的神经网络新框架——GAN。在整个训练过程中可以对捕获数据分布的生成器 G 和判断数据是否为真的判别器 D 进行训练。训练好的 GAN 模型包含性能良好的生成器和判别器, 因此使得人工神经网络具有了创造能力。GAN 为后续许多优异的改进网络模型打下了坚实的基础, 为深度学习的发展做出了重大贡献。

4.2 原理分析

GAN 网络模型可以由 CNN、RNN 等人工神经网络中的一种或多种共同组成, 实现相应功能即可。判别器 D 本质上是一种二分类的分类器, 其目标是对输入样本 $\mathbf{x}$ 进行分类并形成真实样本分布 $P_r(\mathbf{x})$ 和生成样本分布 $P_\theta(\mathbf{x})$ 。若用 $y = 1$ 代表来自真实样本, 用 $y = 0$ 代表来自生成样本。判别器 $D(\mathbf{x}; \phi)$ 的判断输入样本 $\mathbf{x}$ 属于真实样本的分布概率为

$$P(y = 1 | \mathbf{x}) = D(\mathbf{x}; \phi) \quad (5)$$

则输入样本 $\mathbf{x}$ 属于生成样本的分布概率为

$$P(y = 0 | \mathbf{x}) = 1 - D(\mathbf{x}; \phi) \quad (6)$$

其中 θ 和 ϕ 分别是生成器和判别器的参数。生成对抗网络的优点有: (1) 无需大量有标签训练样本, 降低训练成本; (2) 训练时无需推断隐变量; (3) 生成器可用于机器创作; (4) 判别器可用于机器分类。

4.3 网络训练

生成器 G 将真实样本中的元素与随机噪声进行组合, 生成尽可能逼近真实数据的假样本来欺骗判别器 D。判别器 D 通过对输入样本真伪的判断结果来优化网络模型。若判别器 D 能够准确判断出输入样本的真伪, 则需要调节生成器 G 参数使其尽可能生成仿真度更高的假样本; 若判别器 D 总是难以准确判断出输入样本的真伪, 则需要调整判别器 D 参数使其尽可能做出准确的判断。这样判别器 D 和生成器 G 之间就会形成一种相互对抗。其最为理想的结果是判别器 D 已经无法判断真伪, 此时即可产生一个可以用于机器创作的高质量生成器和一个可以用于机器分类的高水平分类器。生成对抗网络的 2 个训练阶段分别为: 判别器训练阶段和生成器训练阶段。该网络的一般训练过程为: (1) 初始化各网络模型的参数; (2) 分别从真实样本集和生成样本集中取出相同数量的 n 个样本, 锁定生成器 G 参数先对判别器 D 进行 k 次训练, 根据相应误差梯度对判别器 D 各参数进行调节; (3) 判别器 D 进行 k 次训练结束之后, 再对生成器 G 进行一次更新, 根据相应误差梯度对生成器 G 各参数进行更新; (4) 经过若干轮更新迭代后, 若可使判别器 D 的判断概率达到 0.5, 即无法区分输入样本的真伪, 方可停止训练。

4.4 模型改进

生成对抗网络也有其缺点:对文本等离散数据的处理效果不佳;对于较大的图片不太可控;存在训练不稳定、模式崩溃、梯度消失等问题。近年来,不断有优秀的改进模型被提出。条件生成对抗网络(conditional generative adversarial network, CGAN)是由 Mirza 和 Osindero^[26]于 2014 年提出的网络模型。该模型以其优异的性能在图像生成、图像修复等领域得到相关人员的广泛关注与好评。该模型也为 GAN 的改进提供了一个很好的思路。其模型结构如图 8 所示。

该模型的主要改进不是在网络结构上,而是额外增加了辅助信息作为输入数据的一部分,通过附加参数与潜在空间影响生成数据,进而对整个网络起到约束的作用,同时有效缓解较大图片不太可控问题、控制该模型的生成效果。除了 CGAN 之外还有深度卷积对抗生成网络(deep convolutional generative adversarial network, DCGAN)^[27]、双向生成对抗网络(bidirectional generative adversarial network, BiGAN)^[28]、Wasserstein 生成对抗网络(Wasserstein

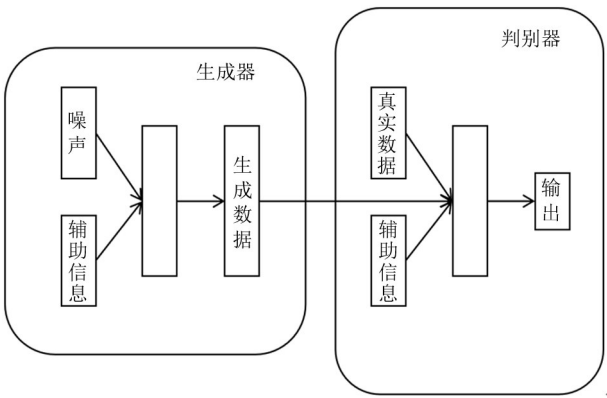


图 8 CGAN 结构示意图

generative adversarial network, WGAN)^[29]、梯度惩罚 Wasserstein 生成对抗网络(Wasserstein generative adversarial network with gradient penalty, WGAN-GP)^[30]、边界平衡生成对抗网络(boundary equilibrium generative adversarial network, BEGAN)^[31]、辅助分类生成对抗网络(auxiliary classifier generative adversarial network, ACGAN)^[32]等改进模型。相关内容如表 3 所示,其模型详细内容可参考文献[33]。

表 3 生成对抗网络改进模型对照表

改进模型名称	具体改进方法	改进模型效果
DCGAN	将 CNN 和 GAN 成功结合	可生成高质量图片 改善网络模型稳定性
BiGAN	将编码器与判别器相结合	便于提取相关特征
WGAN	采用启发式方法 修改网络模型的损失函数,将散度距离改为 Earth-Mover 距离	计算速度快 解决 GAN 训练的不稳定性 缓解甚至消除梯度消失问题
WGAN-GP	将 WGAN 的权重裁剪改为惩罚机制	解决梯度消失,参数不集中等问题
WGAN-LP	使用新惩罚项执行 Lipschitz 约束	提升训练稳定性
BEGAN	使用自编码器架构作为判别器	提高计算收敛速度
ACGAN	增加一个分类器进行辅助训练	生成高分辨率图像

5 图神经网络

图神经网络(graph neural network, GNN)是在图结构数据处理方面具有绝对优势的一类人工神经网络模型,其主要的任务是提取图结构数据中的特征和发掘其模式,可完成例如聚类、预测、生成、分割、

分类等具体任务^[34]。GNN 把实际问题看作图中节点间的连接和信息传递,对节点间的依赖性进行建模,有效实现了对真实世界中非欧式结构数据更好的处理。GNN 在轨迹预测、图像处理、药物医学、交通流量、物理化学和自然语言处理等领域有非凡的表现。除此以外,在网络图分析、知识图谱与知识库、信息检索等领域也有应用。

5.1 模型介绍

GNN 是 Gori 等人^[35]在 2005 年首次提出的,其本质是用 RNN 对节点进行特征映射和节点聚合的方式对图结构数据进行处理。GNN 的主体框架由 RNN 组成,图结构数据中表示每个节点的向量式都可由其自身、相邻节点和相邻边的状态通过特征映射后获得,然后在训练过程中采用反向传播算法对整个网络模型进行优化。随着图结构数据处理需求的不断增加,传统算法有很大局限性,而 GNN 以其可直接对图结构数据进行处理特性受到研究人员的普遍关注。

5.2 原理分析

假设任意一个图结构数据的节点集合为 $\mathbf{v}$, 边集合为 $\mathbf{e}$, 可将此图表示为 $G(\mathbf{v}, \mathbf{e})$ 。两节点间的依赖关系可用相应边进行表示,各边为有向边还是无向边可根据图所表达的实际情况做出判断。用一组神经元来表示节点 $\mathbf{v}$ 的状态 $\mathbf{H}^{(v)}$, 用节点 $\mathbf{v}$ 的输入特征 $\mathbf{x}(\mathbf{v})$ 来表示初始状态。各节点在综合相邻节点和相邻边的消息后,对自身状态进行更新。

$$\mathbf{m}_t^{(v)} = \sum_{u \in N(v)} f(\mathbf{H}_{t-1}^{(v)}, \mathbf{H}_{t-1}^{(u)}, \mathbf{e}^{(u, v)}) \quad (7)$$

$$\mathbf{H}_t^{(v)} = g(\mathbf{H}_{t-1}^{(v)}, \mathbf{m}_t^{(v)}) \quad (8)$$

其中 $N(v)$ 表示节点 v 的相邻节点集合, $\mathbf{m}_t^{(v)}$ 表示在第 t 时刻节点 v 收到的信息, $\mathbf{e}^{(u, v)}$ 为对应边上的特征。图神经网络的优点:可处理结构极其不规则的非欧几里得空间数据;能够高效地利用样本实例

之间的结构性特征;是认知智能发展强有力的推理方法。

5.3 网络训练

一般的图神经网络包括节点、边、图。节点级任务为预测每个节点的类型;边级任务为预测每个边的属性;图级任务为预测整个图的属性。给定一个图,首先将节点转化为递归单元,对所有节点执行 n 次邻域聚合;将边转化为前馈神经网络进行消息传递;对所有节点的嵌入向量求和来表示图形的属性。该网络的 2 个训练阶段分别为前向传递阶段和反向传播阶段。一般训练过程为:(1)初始化网络的参数;(2)输入数据经由连接边前向传播对所有节点执行 n 次邻域聚合得到输出值;(3)计算输出值与实际值之间误差;(4)在误差大于阈值时,求得网络总误差对各参数的梯度,并参考梯度大小对相应参数进行调整;(5)返回第(2)步继续训练,直到误差不大于阈值时,网络训练过程结束。

5.4 模型改进

图神经网络的缺点为更新不动点隐藏状态低效、原始 GNN 无法有效处理边缘信息等问题。随着图神经网络的发展,改进模型不断涌现。分层图神经网络(layered graph neural network, LGNN)是 Bandinelli 等人^[36]于 2010 年提出的网络模型,在相关领域中该模型取得了良好的应用效果。该模型为图神经网络搭建深层结构提供一条行之有效的途径,其模型结构如图 9 所示。

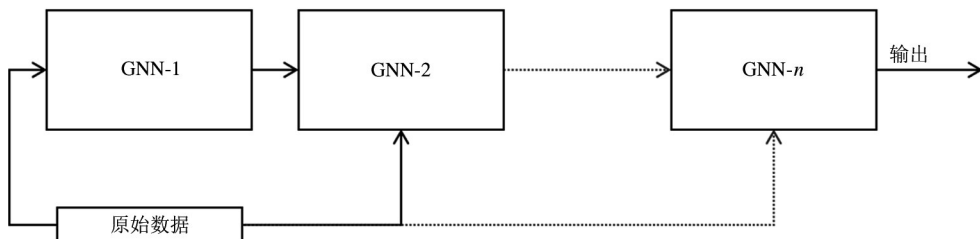


图 9 LGNN 结构示意图

该模型在结构上采用逐层级联的方式,并将原始数据与上一层输出数据共同作为下一层输入信息进行处理。该模型使用渐进式学习方法,有效缓解长期依赖问题。除了 LGNN 外,还有图卷积神经网络(graph convolutional neural network, GCNN)^[37]、门控图神经网络(gated graph sequence neural net-

work, GGS-NN)^[38]、图注意力网络^[39]、图自编码器^[40]、图生成对抗网络(graph generative adversarial network, GraphGAN)^[41]、图分割神经网络(graph partition neural network, GPNN)^[42]、动态图神经网络(dynamic graph neural network, DGNN)^[43]、时空图网络^[44]等改进模型。相关内容如表 4 所示,其模型

详细内容可参考文献[45]。

表 4 图神经网络改进模型对照表

改进模型名称		具体改进方法	改进模型效果
GCNN	将 GNN 与 CNN 相结合		使得卷积操作不仅可以处理传统数据,同时也可以处理图结构数据 几乎可处理所有拓扑结构的节点与图 可实现节点分类与边预测
GSS-NN	使用门控循环单元		改善信息长期传播问题
图注意力网络	该模型是在 GNN 中增加了注意力机制 对于更为重要的节点、路径、子图或模型可以通过全局注意力机制进行更大注意力权值的灵活分配		改善卷积的固化操作问题
图自编码器	利用自动编码器降低图结构数据维度		有效改善图结构数据的节点表示问题 有效避免维度灾难问题
GraphGAN	将 GAN 用于图表示学习		具有很好的启发作用
GPNN	可使节点间局部传播信息与图间全局传播信息进行交替		可快速处理大规模图 减少传播步骤
DGNN	用时间感知 LSTM 在动态图中学习节点表示		能够良好建模边形成的顺序
时空图网络	引入了时间序列特征		可在任意时刻对图结构中时间域和空间域的特征信息进行提取

6 结 论

本文主要对 4 种常用神经网络经典模型分别从模型介绍、原理分析、网络训练、模型改进 4 个方面进行了全面而具体的阐述。每一个经典模型的诞生在技术手段上都给传统领域带来了巨大的变化,而改进模型又进行了技术改良,更有针对性地解决了具体问题,更好地适应具体任务,在实际应用中发挥出更大的作用。当然,也产生了许多新的应用领域。这些专属于深度学习的领域为人类拓宽了视野、拓展了思维。

卷积神经网络和循环神经网络分别在空间尺度和时间尺度为深度学习的发展在数学原理、模型结构、优化方法等方面奠定了坚实基础。生成对抗网络的出现为深度学习提供了一个有别于此前的思路:让模型在相互对抗中得以训练提高。而图神经网络是将深度学习的适用范围从人为规则的欧式数据扩展到自然的不规则的非欧氏数据,使得深度学习进一步贴近人类真实世界。因此,对神经网络经典模型的全面了解更有利于把握深度学习的脉络,

也为研究、应用深度学习提供了较为清晰的指引。

神经网络隐藏层涉及大量超参数设置,往往需要研究人员耐心且认真地调试。更值得注意的是,隐藏层的设计目前并没有一套成熟而可靠的规则,几乎都是凭借调试人员的经验进行的,因此未在本文中重点介绍。深度学习的内容及其丰富,无法做到面面俱到,涉及到具体领域时,还需进行更加深入和细腻的学习。原理部分只能从最简单的数学推导加以说明,不能完全对神经网络的运行机制进行合理的解释,这也是深度学习无法在一些特殊领域、特殊场景中使用的主要原因。可解释性一直是深度学习领域的研究热点。

近年来研究人员对卷积神经网络展开了全面而深入的研究,其发展方向主要包括增加网络模型的深度来达到改善准确率的目的、减少网络模型参数数量来降低训练成本。循环神经网络的未来发展可从网络结构的探究、混合神经网络的构建、加速计算和更新变体等角度进行深入探讨。生成对抗网络与人类对于深度学习的追求最为相符,即可实现机器大脑通过自主学习完全替代甚至超越人类。GAN

的未来发展可从理论探索、内部机理透明化、规范评价标准、领域扩展、图像生成质量与多样性等方面进行深入研究。图神经网络的发展可从优化网络结构、增强网络可解释性、丰富数据结构等方面进行研究。

知识蒸馏是将复杂高效的教师模型所获得的知识迁移到简单轻量化的学生模型上,以实现神经网络在低算力、少资源的设备上良好运行的目的,使得深度学习可以应用在边缘设备上,因此对知识蒸馏的进一步研究具有十分重要的意义。由于深度学习隐式的表达数据背后的潜在特征,参数动辄几百上千万甚至更多,目前仍没有完备的数学理论对模型的优化做指导,使得模型优化只能通过大量数据训练来实现。对深度学习内部原理的研究是进一步发展深度学习的关键问题。通常情况下,提高模型精度往往通过增加模型规模和训练时长来实现,需要消耗大量时间和资源。模型规模、训练时长、模型精度的平衡问题亟待解决。

参考文献

- [1] WARREN S M, WALTER P. A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity [J]. The Bulletin of Mathematical Biophysics, 1943, 5(4): 115-133.
- [2] HOPFIELD J J. Neural networks and physical systems with emergent collective computational abilities [J]. Proceedings of the National Academy of Sciences, 1982, 79(8): 2554-2558.
- [3] RUMELHART D E, HINTON G E, WILLIAMS R. Learning representations by back-propagating errors [J]. Nature, 1986, 323: 533-536.
- [4] HINTON G, SALAKHUTDINOV R R. Reducing the dimensionality of data with neural networks [J]. Science, 2006, 313(5786): 504-507.
- [5] KRIZHEVSKY A, SUTSKEVER I, HINTON G E. ImageNet classification with deep convolutional neural networks [J]. Communications of the ACM, 2017, 60(6): 84-90.
- [6] SILVER D, HUANG A, MADDISON C J, et al. Mastering the game of go with deep neural networks and tree search [J]. Nature, 2016, 529(7587): 484-489.
- [7] SILVER D, SCHRITTWIESER J, SIMONYAN K, et al. Mastering the game of go without human knowledge [J]. Nature, 2017, 550(7676): 354-359.
- [8] BENGIO Y, GOODFELLOW I, COURVILLE A. Deep learning [M]. Cambridge: MIT Press, 2017.
- [9] LECUN Y, BENGIO Y, HINTON G E. Deep learning [J]. Nature, 2015, 521(7553): 436-444.
- [10] LECUN Y, BOTTOU L, BENGIO Y, et al. Gradient-based learning applied to document recognition [J]. Proceedings of the IEEE, 1998, 86(11): 2278-2324.
- [11] HINTON G E, SRIVASTAVA N, KRIZHEVSKY A, et al. Improving neural networks by preventing co-adaptation of feature detectors [EB/OL]. (2012-07-03) [2022-11-07]. <https://arxiv.org/pdf/1207.0580.pdf>.
- [12] ZEILER M D, FERGUS R. Visualizing and understanding convolutional networks [C] // Proceedings of the 13th European Conference on Computer Vision. Zurich: EC-CV, 2014: 818-833.
- [13] SIMONYAN K, ZISSERMAN A. Very deep convolutional networks for large-scale image recognition [EB/OL]. (2014-09-04) [2022-11-07]. <https://arxiv.org/pdf/1409.1556.pdf>.
- [14] SZEGEDY C, LIU W, JIA Y, et al. Going deeper with convolutions [C] // Proceedings of the 2015 IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition. Boston: IEEE, 2015: 1-9.
- [15] HE K, ZHANG X, REN S, et al. Deep residual learning for image recognition [C] // Proceedings of the 2016 IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition. Seattle: IEEE, 2016: 770-778.
- [16] ALZUBAIDI L, ZHANG J, HUMAIDI A J, et al. Review of deep learning: concepts, CNN architectures, challenges, applications, future directions [J]. Journal of Big Data, 2021, 8(1): 1-74.
- [17] ELMAN J L. Finding structure in time [J]. Cognitive Science, 1990, 14(2): 179-211.
- [18] HOCHREITER S, SCHMIDHUBER J. Long short-term memory [J]. Neural Computation, 1997, 9(8): 1735-1780.
- [19] YAO K, COHN T, VYLOMOVA K, et al. Depth-gated LSTM [EB/OL]. (2015-08-16) [2022-11-07]. <https://arxiv.org/pdf/1508.03790.pdf>.
- [20] LEI T, ZHANG Y, ARTZI Y. Training RNNs as fast as CNNs [EB/OL]. (2017-09-08) [2022-11-07]. <https://arxiv.org/pdf/1709.02755.pdf>.
- [21] SCHUSTER M, PALIWAL K K. Bidirectional recurrent neural networks [J]. IEEE Transactions on Signal Processing, 1997, 45(11): 2673-2681.
- [22] CHO K, VAN MERRIËNBOER B, BAHDANAU D, et al. On the properties of neural machine translation: Encoder-decoder approaches [EB/OL]. (2014-09-03) [2022-11-07]. <https://arxiv.org/pdf/1409.1259.pdf>.
- [23] CHE Z, PURUSHOTHAM S, CHO K, et al. Recurrent neural networks for multivariate time series with missing values [J]. Scientific Reports, 2018, 8(1): 1-12.
- [24] 刘建伟, 宋志妍. 循环神经网络研究综述 [J]. 控制与决策, 2022, 37(11): 2753-2768.
- [25] GOODFELLOW I, POUGET-ABADIE J, MIRZA M, et al. Generative adversarial nets [C] // Proceedings of the 28th Conference on Neural Information Processing Systems. Montreal: Association for Computational Linguistics, 2014: 2672-2680.
- [26] MIRZA M, OSINDERO S. Conditional generative adversarial nets [EB/OL]. (2014-11-06) [2022-11-07]. <https://arxiv.org/pdf/1411.1784.pdf>.
- [27] RADFORD A, METZ L, CHINTALA S. Unsupervised

- representation learning with deep convolutional generative adversarial networks[EB/OL]. (2015-11-19) [2022-11-07]. <https://arxiv.org/pdf/1511.06434.pdf>.
- [28] DONAHUE J, KRÄHENBÜHL P, DARRELL T. Adversarial feature learning[EB/OL]. (2016-05-31) [2022-11-07]. <https://arxiv.org/pdf/1605.09782.pdf>.
- [29] ARJOVSKY M, CHINTALA S, BOTTOU L. Wasserstein GAN[EB/OL]. (2017-06-26) [2022-11-07]. <https://arxiv.org/pdf/1701.07875.pdf>.
- [30] GULRAJANI I, AHMED F, ARJOVSKY M, et al. Improved training of Wasserstein GANs[C]//Proceedings of the 31st Annual Conference on Neural Information Processing Systems (NIPS). Long Beach: Association for Computational Linguistics, 2017:5768-5778.
- [31] BERTHELOT D, SCHUMM T, METZ L. Began: Boundary equilibrium generative adversarial networks[EB/OL]. (2017-03-31) [2022-11-07]. <https://arxiv.org/pdf/1703.10717.pdf>.
- [32] ODEA A, OLAH C, SHLENS J. Conditional image synthesis with auxiliary classifier GANs[C]//Proceedings of the 34th International Conference on Machine Learning. Sydney: IMLS, 2017:2642-2651.
- [33] PAN Z, YU W, YI X, et al. Recent progress on generative adversarial networks (GANs): a survey[J]. IEEE Access, 2019,7:36322-36333.
- [34] 吴博, 梁循, 张树森, 等. 图神经网络前沿进展与应用[J]. 计算机学报, 2022,45(1):35-68
- [35] GORI M, MONFARDINI G, SCARSELLI F. A new model for learning in graph domains[C]//Proceedings of the 2005 IEEE International Joint Conference on Neural Networks. Montreal: IEEE, 2005:729-734.
- [36] BANDINELLI N, BIANCHINI M, SCARSELLI F. Learning long-term dependencies using layered graph neural networks[C]//The 2010 International Joint Conference on Neural Networks (IJCNN). Barcelona: IEEE, 2010:1-8.
- [37] BRUNA J, ZAREMBA W, SZLAM A, et al. Spectral networks and locally connected networks on graphs[EB/OL]. (2013-12-21) [2022-11-07]. <https://arxiv.org/pdf/1312.6203.pdf>.
- [38] LI Y, TARLOW D, BROCKSCHMIDT M, et al. Gated graph sequence neural networks[EB/OL]. (2015-11-17) [2022-11-07]. <https://arxiv.org/pdf/1511.05493.pdf>.
- [39] VELIČKOVIĆ P, CUCURULL G, CASANOVA A, et al. Graph attention networks[EB/OL]. (2017-10-30) [2022-11-07]. <https://arxiv.org/pdf/1710.10903.pdf>.
- [40] TIAN F, GAO B, CUI Q, et al. Learning deep representations for graph clustering[C]//Proceedings of the 28th AAAI Conference on Artificial Intelligence. Quebec City: AAAI Press, 2014:1293-1299.
- [41] WANG H, WANG J, WANG J, et al. Graphgan: graph representation learning with generative adversarial nets[EB/OL]. (2017-11-22) [2022-11-07]. <https://arxiv.org/pdf/1711.08267.pdf>.
- [42] LIAO R, BROCKSCHMIDT M, TARLOW D, et al. Graph partition neural networks for semi-supervised classification[EB/OL]. (2018-03-16) [2022-11-07]. <https://arxiv.org/pdf/1803.06272.pdf>.
- [43] MA Y, GUO Z, REN Z, et al. Streaming graph neural networks[C]//Proceedings of the 43rd International ACM SIGIR Conference on Research and Development in Information Retrieval, Electr Network. Xi'an: Association for Computing Machinery, 2020:719-728.
- [44] YU B, YIN H, ZHU Z. Spatio-temporal graph convolutional networks: a deep learning framework for traffic forecasting[EB/OL]. (2017-09-14) [2022-11-07]. <https://arxiv.org/pdf/1709.04875.pdf>.
- [45] ZHOU J, CUI G, HU S, et al. Graph neural networks: a review of methods and applications[J]. AI Open, 2020, 1:57-81.

A review of classical models of neural networks

HUANG Dongrui*, MAO Kebiao**, GUO Zhonghua*, XU Leyuan*, HU Zemin*, ZHAO Rui*

(* School of Physics and Electronic-Engineering, Ningxia University, Yinchuan 750021)

(** Institute of Agricultural Resources and Regional Planning, Chinese Academy of Agricultural Sciences, Beijing 100081)

Abstract

In recent years, deep learning has shown outstanding performance and great application potential in many fields. Neural network model is an important carrier of deep learning, so it is necessary to analyze it deeply. However, so far, the development of neural network models has shown the characteristics of diversification and application specialization, such as YOLO series models for object detection and Transformer series models for machine translation. This paper attempts to find an efficient way to understand deep learning by analyzing several classical neural network models. This review first summarizes the development of deep learning. Then the convolutional neural network (CNN), recurrent neural network (RNN), generative adversarial network (GAN) and graph neural network (GNN) are described in detail from the aspects of model introduction, principle analysis, network training and model improvement. Finally, the above neural network models are summarized and the future development of deep learning is prospected.

Key words: deep learning, convolutional neural network (CNN), recurrent neural network (RNN), generative adversarial network (GAN), graph neural network (GNN)