

学校编码: 10384

分类号 _____ 密级 _____

学号: 200324007

UDC _____

厦 门 大 学

硕 士 学 位 论 文

Hopfield 神经网络的优化及转移矩阵在 二维半柔软聚合物研究中的应用

Improvement of the Hopfield Neural Network and
Transfer-matrix calculation of positional distribution in the
2-dimensional semiflexible polymer

周 震

指导教师姓名: 赵 鸿 教授

专业名称: 理 论 物 理

论文提交日期: 2006 年 5 月

论文答辩时间: 2006 年 6 月

学位授予日期: 2006 年 月

答辩委员会主席: _____

评 阅 人: _____

2006 年 5 月

厦门大学学位论文原创性声明

兹提交的学位论文，是本人在导师指导下独立完成的研究成果。本人在论文写作中参考的其他个人或集体的研究成果，均在文中以明确方式标明。本人依法享有和承担由此论文产生的权利和责任。

声明人（签名）：

年 月 日

厦门大学学位论文著作权使用声明

本人完全了解厦门大学有关保留、使用学位论文的规定。厦门大学有权保留并向国家主管部门或其指定机构送交论文的纸质版和电子版，有权将学位论文用于非赢利目的的少量复制并允许论文进入学校图书馆被查阅，有权将学位论文的内容编入有关数据库进行检索，有权将学位论文的标题和摘要汇编出版。保密的学位论文在解密后适用本规定。

本学位论文属于

- 1、保密（ ），在 年解密后适用本授权书。
- 2、不保密（ ）

（请在以上相应括号内打“√”）

作者签名：

日期： 年 月 日

导师签名：

日期： 年 月 日

目 录

摘要.....	I
Abstract.....	II
第一章 神经网络简介.....	1
1.1 历史.....	1
1.2 神经元模型.....	4
1.2.1 生物模型.....	4
1.2.2 数学模型.....	5
1.3 神经网络模型.....	9
1.4 学习规则.....	9
1.5 小结.....	10
参考文献.....	11
第二章 蒙特卡罗变异优化选择规则.....	12
2.1 原理.....	12
2.2 设计过程.....	13
2.3 网络特性.....	15
2.3.1 伪吸引子的完全消失.....	15
2.3.2 三种相的划分.....	17
2.4 小结.....	19
参考文献.....	20
第三章 Hopfield神经网络的优化.....	21
3.1 Hopfield神经网络.....	21
3.1.1 离散的Hopfield神经网络模型.....	21
3.1.2 稳定性.....	22
3.1.3 联想记忆功能.....	23
3.2 Hopfield网络的一些缺点.....	24

3.3 Hopfield 神经网络的优化.....	26
3.4 小结.....	31
参考文献.....	32
第四章 转移矩阵在二维半柔软聚合物研究中的应用.....	33
4.1 引言.....	33
4.2 转移矩阵方法.....	35
4.2.1 末端矢量分布.....	35
4.2.2 方向边界条件.....	36
4.2.3 没有力作用下的末端间分布.....	37
4.2.4 有力作用下的末端间分布.....	38
4.2.5 热平衡下局部缺陷.....	38
4.2.6 在固定位置上的永久弯曲.....	41
4.3 DNA 的弹性和环化.....	42
4.4 小结.....	45
参考文献.....	47
第五章 总结与展望.....	49
致谢.....	51
附件：硕士期间发表和完成的文章.....	52

Contents

Abstract in Chinese	I
Abstract in English	II
1. Introduction to Neural Netork	1
1.1 History	1
1.2 Models of A Neuron	4
1.2.1 Living Model of A Neuron	4
1.2.2 Mathematic Model of A Neuron.....	5
1.3 Neural Network Model	9
1.4 Learning Rule	9
1.5 Summary	10
References	11
2. MC-adaptation Rule	12
2.1 Theory	12
2.2 Design Processes	13
2.3 Network Characteristic	15
2.3.1 No Spurious Memorie.....	15
2.3.2 Three Phases	17
2.4 Summary	19
References	20
3. Improvement of the Hopfield Neural Network	21
3.1 Hopfield Neural Network	21
3.1.1 The Discrete Hopfield Model.....	21
3.1.2 Stability.....	22
3.1.3 Associative Memory Ability.....	23
3.2 Defects in Hopfield Neural Network	24

3.3 Improvement of the Hopfield Neural Network	26
3.4 Summary	31
References	32
4. Transfer-matrix calculation of positional distribution in the 2-dimensional semiflexible polymer.....	33
4.1 Introduction.....	33
4.2 Transfer-matrix Method	35
4.2.1 End-to-end vector distribution	35
4.2.2 Orientational boundary conditions	36
4.2.3 End-to-end distribution for zero applied force	37
4.2.4 End-to-end distribution for polymer under force	38
4.2.5 Localized defects in thermal equilibrium	38
4.2.6 Permanent bends at fixed locations	41
4.3 Flexibility and Cyclization of dsDNA	42
4.4 Summary	45
References	47
5. Summary and Prospect	49
Acknowledgement.....	51
Publication and to be published list	52

摘 要

本文主要分为两个部分，第一部分为用蒙特卡罗变异优化选择规则优化 Hopfield 神经网络，第二部分为转移矩阵在二维半柔软聚合物研究中的应用。

第一部分研究表明蒙特卡罗变异优化选择规则可以用来优化神经网络的性能。在第一部分我们以 Hopfield 网络为例，运用蒙特卡罗变异优化选择规则在保持网络的整体结构基本不变的情况下，优化 Hopfield 神经网络的动力学特性，提高网络的存储功能和存储质量。在优化后的网络中，每个记忆模式都被严格设计成网络的不动点吸引子，从而每个模式都能够被精确联想，也就是说如果一个初态能被某个记忆模式所吸引，那么它一定会被严格吸引到这个模式上而不是这个模式的邻域，这就避免了 Hopfield 网络中需要人为引入一个描述相似性的阈值来判断某个记忆模式是否被成功联想。

第二部分运用转移矩阵的方法计算了在 DNA 上两点之间矢量的统计分布。解析地计算了一大类聚合物模型中的转移矩阵的矩阵元。还特别研究了包含 hinge 和 kink 刺激的半柔软的聚合物。我们着重对有限长 dsDNA 末端间分布的计算。我们还特别计算了生化实验经常研究的 J 因子。我们的结果与以前环化计算的结果非常的一致。我们还研究了 hinge 对短 DNA 的影响，发现 hinge 可以使短 DNA 的 J 因子提高，这就为我们在实验中观察到大的 J 因子提供了一个方法。我们也考虑了边界条件对 J 因子的影响。

关键词：Hopfield 神经网络；蒙特卡罗变异优化选择规则；转移矩阵方法；

Abstract

This paper is divided into two parts. The First part is improvement of the Hopfield Neural Network by MC-adaptation Rule. The Second part is Transfer-matrix calculation of positional distribution in the 2-dimensional semiflexible polymer.

In the first part, we show that MC-adaptation Rule can be applied to improve neural networks. We use Hopfield neural network as a example, we show that the performance of the Hopfield neural networks, especially the quality of the recall and the capacity of the effective storing, can be greatly improved by MC-adaptation Rule without altering the whole structure of the network. All the memory patterns are stored exactly as fixed-point attractors of the improved network, and each memory pattern will be recalled perfectly. This feature avoids applying the overlap criterion to judge whether a memory is recalled correctly as does in the Hopfield neural networks.

In the second part, we compute statistical distribution of the vector between two points along a dsDNA by transfer matrix method. We compute the transfer matrix elements analytically for a wide variety of polymer models. We pay particular attention to the semiflexible polymer including localized “flexible hinge” and “kinks” excitations. Our calculations emphasize calculation of the end-to-end distributions for finite-length dsDNAs. We specially compute the “J factor” commonly measured in biochemistry laboratory. Results are in excellent agreement with previous cyclization calculations for the semiflexible polymer. We study the effect of hinge for short dsDNA and find that hinge can enhance the “J factor” for short dsDNA, this provides a way to generate the large J factors observed experimentally. We also consider the effect of the boundary conditions for cyclization on the J factor.

Key words: Hopfield Network; MC-adaptation Rule; Transfer-Matrix Method

第一章 神经网络简介

神经网络，又名并行分布式处理器、适应系统、自组织系统、神经计算机、连接机构、类神经网络等，它是由模仿人类心智和脑活动所发展出来的一种模型。就网络架构而言，它是由许多简单而且相互连结的处理元件所组成，就网络的功能而言，它是一种由生物模型所启发而产生出来的新型态资讯处理与计算方式。

神经网络的理论衍生自各个不同的学科，其中，包括心理学、数学、神经科学、物理学、计算机科学、生物学、工程科学、哲学等，尽管这些领域的研究方向不尽相同，但它们的目标却是一致的——都是为了建立一个智慧型的系统，以满足各方面的需要。

1.1 历史

人类的大脑对于视觉、听觉、嗅觉、触觉、味觉等讯息具有强大的处理能力，而反观目前模仿人类的机器，比如电脑和机器人，大都缺乏这样的能力。人们为了创造出具有大脑功能的机器，于是神经网络就作为一门学科也就自然的诞生了。

神经网络兴起的年代，大约和电脑相近，但是它们的发展过程却不一样。电脑已经成为人类生活中不可或缺的工具；相反地，神经网络在 1960 年代末期，已渐渐被人们所淡忘，而当人工智能电脑在发展过程中遇到挫折时，神经网络才又得到人们的重视。

神经网络的历史和许多的学科一样，是由各个时期的研究成果所综合而成的。就神经网络的发展的过程而言，我们大致上可以将它分成探索期、低潮期和高潮期：

1. 探索期：1943 年~1969 年

1943 年美国心理学家 W. S. McCulloch 和美国数学家 W. Pitts 提出一种称为“似脑机器” (Mindlike Machine) 的思想，这种机器可由具有生物脑神经元特性的互连模型来制造，这就是人工神经网络的概念。他们构造了一个表示神经元的模型，即 M-P 模型^[1]，这是第一个关于人工

神经元的计算模型，由此开创了神经科学理论研究的时代。但是，当时的神经元模型，并没有学习的能力。

直到 1949 年加拿大心理学家Hebb从心理学的角度提出了至今仍然对人工神经网络的理论有着重要影响的Hebb 学习规则^[2]。他认为在学习过程中相关的生物脑神经元之间突触联系的强度将发生变化，从而导致突触连接的增强和传递效能的提高。之后Hebb学习规则成为连接学习算法的主要基础，“联想记忆”(Associative Memory)类模型由此开始单独提出。

神经网络第一次被成功地应用是在 1957 年到 1958 年之间。1958 年美国心理学家Rosenblatt 设计完成“感知器”(Perceptron)模型^[3]，这是一个单层人工神经网络，是历史上第一个有实用价值的人工神经网络系统，它标志着人工神经网络的研究开始从理论真正走向工程实践，由此也掀起了研究人工神经网络的第一次高潮。后来生产出基于感知器模型的人工神经网络硬件设备，这是现在仍然在使用中的历史最悠久的人工神经网络模型。1959 年Widrow 提出了自适应线性元件 Adaline(Adaptive Linear Element)模型^[4]，它是连续取值的线性网络，主要用于自适应系统。这种模型与当时占主导地位的以符号推理为特征的传统人工智能途径完全不同，对人工神经网络研究起了很大的促进作用。后来又发展出多层自适应线性元件Madaline (Multiple Adaptive Linear Element)模型，这是第一个用于解决现实问题的人工神经网络，主要是作为自适应过滤器用来消除电话线路中的回声，到现在还在商业上使用。

然而，在 1960 年代中期。Minsky和Papert从数学上证明了感知器只能解决线性可分问题，对于线性不可分即非线性的复杂逻辑问题则无能为力^[5]，例如异或问题，从此对它的研究热度就小了下去。由于理论研究水平有限，应用前景也不太明朗，再加上Von Neumann计算机大发展的冲击，以及当时社会中普遍对于会出现具有人类思维的机器的恐惧心理，直接导致人工神经网络的研究工作陷入了低谷。

2. 低潮期：1969~1982 年

在这十三年中，神经网络地发展虽然处于低潮期，但是神经网络的研究工作并没有停止下来，许多学者还在默默地耕耘。并且得出了许多有意义的理论和方法。例如Arbib提出的竞争模型^[6]，Kohonen提出的自组织映射模型^[7]，Grossberg提出的自适应谐振模型^[8]，Fukushima提出的新认知机^[9]等。连接机制和并行分布处理的概念也是在这段时期提出来的。

3. 高潮期：1982年～现在

在1980年代初期，美国物理学家Hopfield在生物脑神经元交互作用的基础上提出了一种递归型人工神经网络，并且引入能量函数的概念，给出了稳定性的判据，这就是著名的Hopfield神经网络模型^[10]。这一成果是人工神经网络研究中的突破性进展，拓展了人工神经网络用于联想记忆和优化计算的途径。1984年他用这一模型成功解决了复杂度为NP的旅行商问题(TSP)。使得神经网络的研究又再度热起来了。

在这之后，Ballard的连接网络模型^[11]给出了传统人工智能计算和生物计算的区别，提出了并行分布处理的计算原则。Hinton和Sejnowski等人从统计物理学的概念和方法中得到启发，提出Boltzman机模型^[12]，首次给出了多层网络的学习算法。1986年Rumelhart和McClelland等人提出并行分布处理的理论，同时提出了多层网络的误差反向传播学习算法，即BP(Back Propagation)算法^[13]。该算法从实践上证明了人工神经网络超强的运算能力，成为现在实际中最常用到的人工神经网络模型。

经过这几个阶段的发展，人工神经网络的模型已有上百种之多，常用的也有十几种以上，其应用范围更是涉及到各个方面。在民用应用领域里面，主要有语言识别，图像识别与理解，计算机视觉，智能机器人故障检测，实时语言翻译，企业管理，市场分析，决策优化，物资调运，自适应控制，专家系统，智能接口，神经生理学，心理学和认知科学研究等；在军用应用领域里面，主要有语音、图像信息的录取与处理，雷达、声纳的多目标识别与跟踪，战场管理和决策支持系统，军用机器人控制，复杂情况、信息的快速录取、分类与查询，导弹的智能引导，保密通讯，航天器的姿态控制等。

1.2 神经元模型

人类的大脑大约是由 10^{11} 个神经元所组成的一个庞大网络，为了要研究人类大脑所具有的功能，我们就必须首先要来探讨一下神经元的模型。

1.2.1 生物模型

一个典型的神经元生物模型如图1.1所示，它包含以下几个部分：

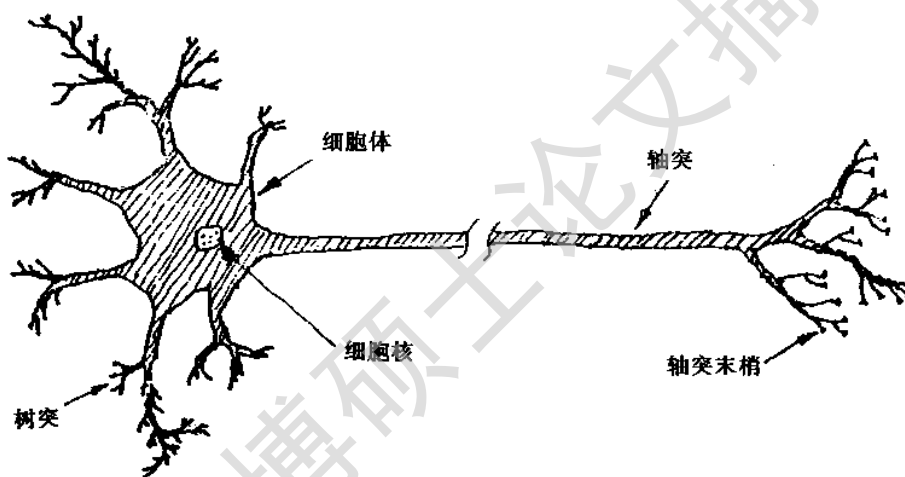


图1.1 神经元生物模型

- (1) 细胞体：是由细胞核、细胞质和细胞膜所组成的，位于细胞体内部及其周围的元素有钠离子、钙离子、钾离子和氯离子等，其中，钾离子大部分位于细胞体内，而钠离子大部分在细胞体外。当细胞体外的钠离子扩散到细胞体内时，它会引起细胞膜电位的增加，这就是所谓的激励作用；当细胞体内的钾离子扩散到细胞体外时，它会引起细胞膜电位的下降，这就是所谓的抑制作用。
- (2) 轴突：是一条由细胞体向外延伸的神经纤维，它主要的工作是将细胞体发射出来的信号，送到其它的神经元上去，不会改变信号的强度。
- (3) 树突：是由细胞体向外延伸的树状架构，它主要的作用是被用来接收从其它神经元传送过来的信号。

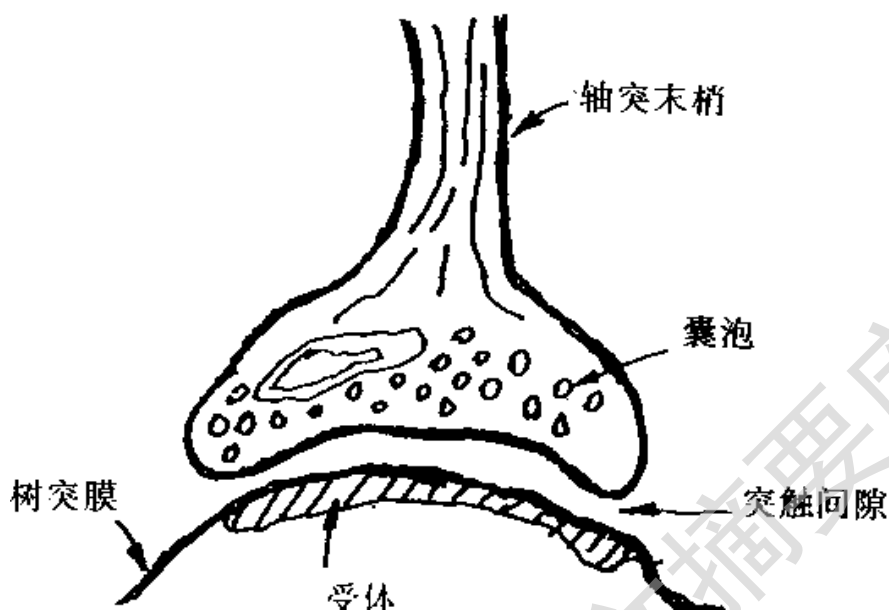


图1.2 突触结构

- (4) 突触：神经元之间的信号是通过轴突与树突来传递的，而连接轴突与树突的界面就是突触。每个神经元大约有 $10^3 \sim 10^4$ 各突触，而大部分的突触都是属于化学性的接触，也就是说，轴突所送出来的信号，会在突触的地方分泌一种传导物质，称为神经传导物，这种传导物会使得接收神经元的细胞体，产生电位的变化。图1.2是突触的结构图

1.2.2 数学模型

仿造神经元的生物模型，我们可以得到图 1.3 的神经元数学模型。在这个模型中，神经元又称为短期记忆体、处理元件、节点或临界值元件，它一般是一多输入/单输出的非线性器件，它的输入端 x_i 相当于生物模型中的树突，而它的输出端 y_j 相当于轴突，至于权值 w_{ij} 则相当于生物模型中的突触。

上述模型，基本上可以分成下列三个部分：

1. 信号的传递

假设神经元 i 到神经元 j 的权值为 w_{ij} ， $x_i(t)$ 为神经元 i 的输入信号，则

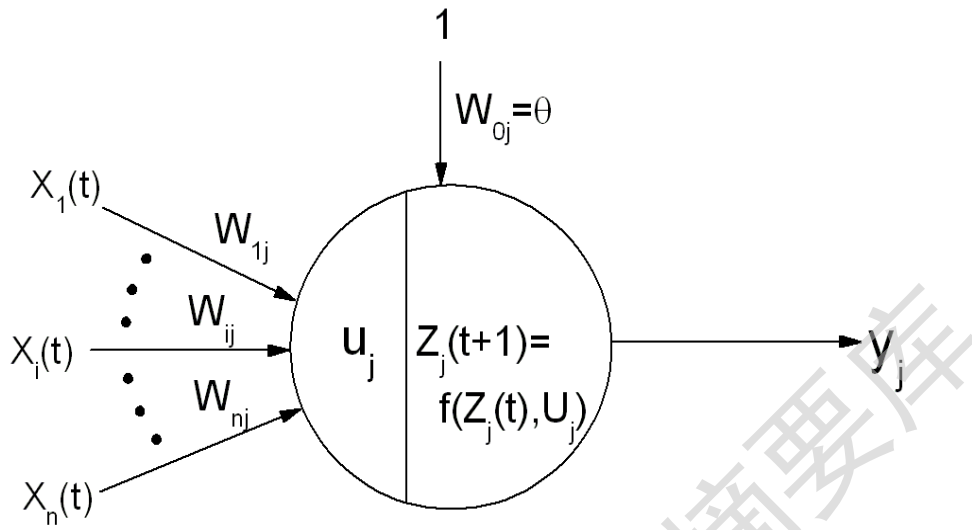


图 1.3 神经元数学模型

传递到神经元 j 的信号为：

$$\mu_j = \sum_{i=0}^n w_{ij} x_i(t),$$

其中， w_{0j} 表示神经元 j 的临界值， $x_0(t)=1$ 。

2. 神经元的状态

$$z_j(t+1) = f(z_j(t), \mu_j),$$

其中， $f(\cdot, \cdot)$ 为一非线性函数。当神经元没有内部状态时，可令 $z_j = \mu_j$ 。

3. 神经元的输出

$$y_j = h(z_j),$$

其中， $h(\cdot)$ 为线性或非线性函数。

神经元输出所用的非线性函数包含以下几种常见的函数：

(1) 对称硬极限函数，如图 1.4

$$h(x) = \begin{cases} +1 & x \geq 0 \\ -1 & x < 0 \end{cases}$$

或二元值函数，如图 1.5

$$h(x) = \begin{cases} 1 & x \geq 0 \\ 0 & x < 0 \end{cases}$$

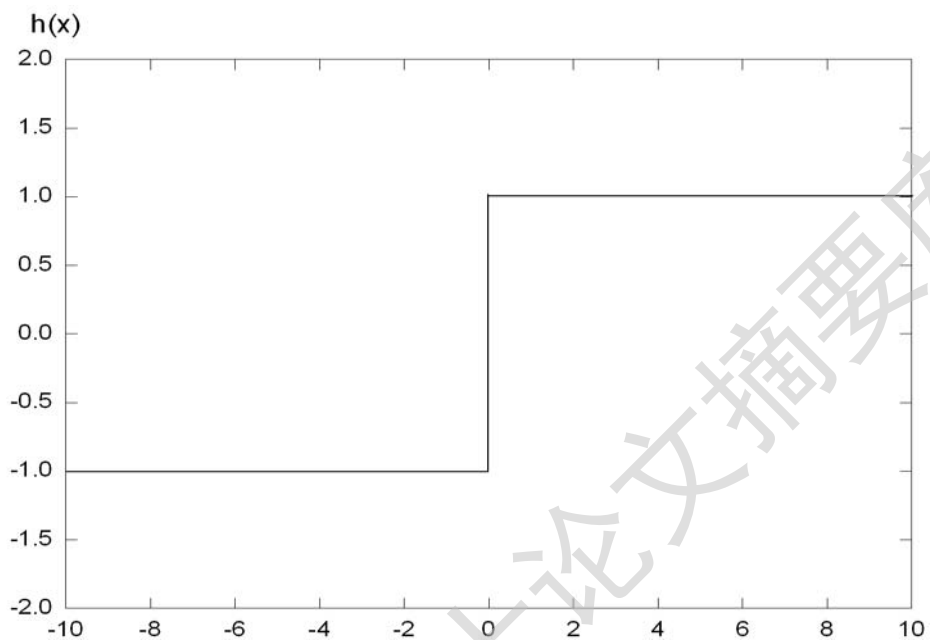


图 1.4 对称硬极限函数

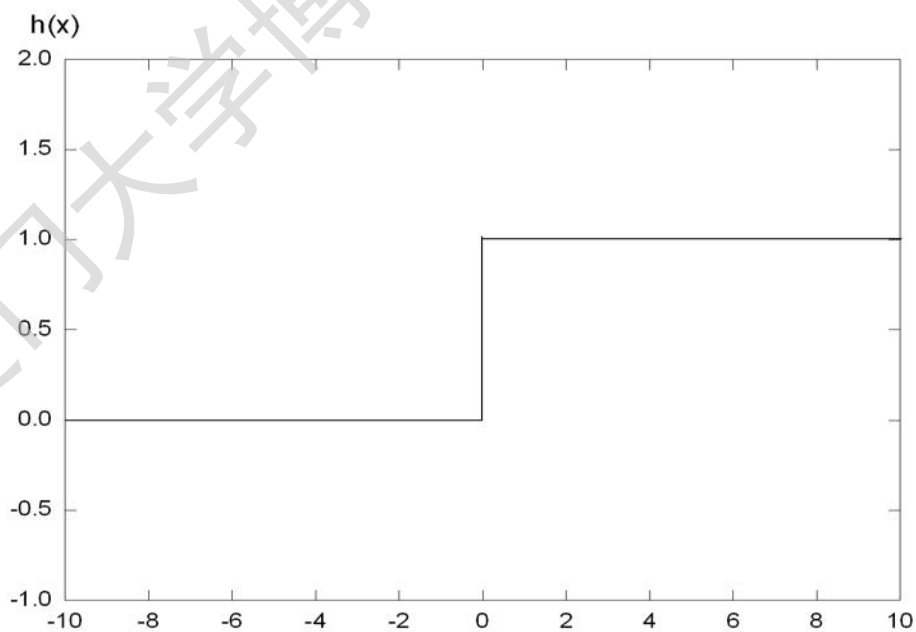


图 1.5 二元值函数

Degree papers are in the "[Xiamen University Electronic Theses and Dissertations Database](#)". Full texts are available in the following ways:

1. If your library is a CALIS member libraries, please log on <http://etd.calis.edu.cn/> and submit requests online, or consult the interlibrary loan department in your library.
2. For users of non-CALIS member libraries, please mail to etd@xmu.edu.cn for delivery details.

厦门大学博硕士论文摘要库