在介绍人工神经网络之前,我们先来介绍下最简单的神经网络:感知器。

**感知器**,也是最简单的神经网络(只有一层)。感知器是由美国计算机科学家 Roseblatt 于 1957年提出的。感知器可谓是最简单的人工神经网络,只有一个神经元。感知器也可以看出是线性分类器的一个经典学习算法。

感知器是对生物神经细胞的简单数学模拟。

感知器是模拟生物神经元行为的机器,有与生物神经元相对应的部件,如权重(突触)、偏置(阈值)及激活函数(细胞体),输出为0或1。

下面我们来介绍下感知器模型和学习算法。

# 4.1 两类感知器

图4.1给出了感知器模型的结构。

给定一个n维的输入 $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \cdots, x_n)$ ,

$$\hat{y} = \begin{cases} +1 & \stackrel{\cong}{\mathbf{w}}^{\mathsf{T}} \mathbf{x} + b > 0 \\ -1 & \stackrel{\cong}{\mathbf{w}}^{\mathsf{T}} \mathbf{x} + b \leq 0 \end{cases}$$

$$(4.1)$$

其中, $\mathbf{w}$ 是n维的权重向量,b是偏置。 $\mathbf{w}$ 和b是未知的,需要从给定的训练数据集中学习得到。

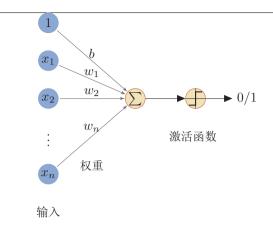


图 4.1: 感知器模型

不失一般性,我们使用增广的输入和权重向量,公式4.1可以简写为:

$$\hat{y} = \begin{cases} +1 & \stackrel{\text{d}}{=} \mathbf{w}^{\mathsf{T}} \mathbf{x} > 0 \\ -1 & \stackrel{\text{d}}{=} \mathbf{w}^{\mathsf{T}} \mathbf{x} \le 0 \end{cases}$$

$$(4.2)$$

接下来我们看下感知器是如何学习的。

## 4.1.1 感知器学习算法

给定N个样本的训练集:  $(\mathbf{x}_i, y_i), i = 1, \cdots, N$ 。我们希望学习到参数 $\mathbf{w}*$ ,使得

$$\mathbf{w}^{*^{\mathrm{T}}}\mathbf{x}_{i} > 0 \quad \stackrel{\text{def}}{=} y_{i} > 0,$$

$$\mathbf{w}^{*^{\mathrm{T}}}\mathbf{x}_{i} < 0 \quad \stackrel{\text{def}}{=} y_{i} < 0.$$

$$(4.3)$$

公式4.3等价于  $\mathbf{w}^{*T}(y_i\mathbf{x}_i) > 0$ 。

Rosenblatt [1958] 首次提出了感知器的学习算法。这个算法是错误驱动的在线学习算法。先初始化一个权重向量 $\mathbf{w}_0$  (通常是全零向量),然后每次分错一个样本时,就用这个样本来更新权重。具体的学习过程如算法4.1所示。

4.1 两类感知器 3

#### 算法 4.1: 两类感知器算法

#### 4.1.2 收敛性证明

Novikoff [1963] 证明对于两类问题,如果训练集是线性可分的,那么感知器算法可以在有限次迭代后收敛。然而,如果训练集不是线性分隔的,那么这个算法则不能确保会收敛。

定义 4.1 – 两类线性可分: 对于训练集 $\mathcal{D} = \{(x_i, y_i) \mid y_i \in \{-1, 1\}\}_{i=1}^n$ ,如果存在一个正的常数 $\gamma(\gamma > 0)$  和权重向量 $\mathbf{w}^*$ ,并且  $\|\mathbf{w}^*\| = 1$ ,对所有i都满足 $(\mathbf{w}^*)^{\mathrm{T}}(y_i\mathbf{x}_i) > \gamma$ ( $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^m$  为样本 $x_i$ 的增广特征向量),那么训练集 $\mathcal{D}$  是线性可分的。

在数据集是两类线性可分的条件下,我们可以证明如下定理。

定理 4.1 – 感知器收敛性:对于任何线性可分的训练集 $\mathcal{D} = \{(x_i, y_i)\}_{i=1}^n$ 假设 R 是所有样本中输入向量的模的最大值。

$$R = \max_{i} \|x_i\|$$

# 那么在感知器学习算法4.1中,总共的预测错误次数 $K < \frac{R^2}{\gamma^2}$ 。

证明. 权重向量的更新公式为:

$$\mathbf{w}_k = \mathbf{w}_{k-1} + y_k \mathbf{x}_k, \tag{4.4}$$

这里,  $\mathbf{x}_k, y_k$  为第 k 个错误分类的样本。

因为初始权重向量为0,因此在第K次更新时,

$$\mathbf{w}_K = \sum_{k=1}^K y_k \mathbf{x}_k. \tag{4.5}$$

那么,

(1)  $\|\mathbf{w}_K\|^2$  的上界为:

$$\|\mathbf{w}_{K}\|^{2} = \|\mathbf{w}_{K-1} + y_{k}\mathbf{x}_{k}\|^{2}$$

$$= \|\mathbf{w}_{K-1}\|^{2} + \|y_{k}\mathbf{x}_{k}\|^{2} + 2y_{k}\mathbf{w}_{K-1}^{\mathsf{T}}\mathbf{x}_{k}$$

$$\leq \|\mathbf{w}_{K-1}\|^{2} + R^{2}$$

$$\leq \|\mathbf{w}_{K-2}\|^{2} + 2R^{2}$$

$$\leq K \cdot R^{2}$$
(4.6)

(2) 我们再来看下  $\|\mathbf{w}_K\|^2$  的下界。

$$\|\mathbf{w}_{K}\|^{2} = \|\mathbf{w}^{*}\|^{2} \cdot \|\mathbf{w}_{K}\|^{2}$$

$$\geq \|\mathbf{w}^{*T}\mathbf{w}_{K}\|^{2}$$

$$= \|\mathbf{w}^{*T}\sum_{k=1}^{K} (y_{k}\mathbf{x}_{k})\|^{2}$$

$$= \|\sum_{k=1}^{K} \mathbf{w}^{*T} (y_{k}\mathbf{x}_{k})\|^{2}$$

$$\geq K^{2}\gamma^{2}.$$
(4.7)

由公式4.6和4.7,得到

 $K^2 \gamma^2 \le ||\mathbf{w}_K||^2 \le K \times R^2 \tag{4.8}$ 

 $y_k \mathbf{w}_{K-1}^{\mathrm{T}} \mathbf{x}_k < 0.$ 

 $\|\mathbf{w}^*\| = 1.$ 

两个向量内积的平方一 定小于等于这两个向量 的模的乘积

$$\mathbf{w}^{*T}(y_i\mathbf{x}_i) > \gamma, \forall i.$$

4.2 多类感知器

取最左和最右的两项,进一步得到, $K^2\gamma^2 \leq K \cdot R^2$ 。然后两边都除K,最终得到

$$K \le \frac{R^2}{\gamma^2}. (4.9)$$

因此,在线性可分的条件下,算法4.1会在  $\frac{R^2}{\gamma^2}$  步内收敛。如果训练集不s是线性可分的,就永远不会收敛 [Freund and Schapire, 1999]。

## 4.2 多类感知器

原始的感知器的输出是0或1,不能提供概率形式的输出,因此只能处理两类问题。为了使得感知器能处理多类问题以及更复杂的结构化学习任务,我们引入一个特征函数 $\phi(x,y)$ 将输入输出对映射到一个向量空间中[Collins, 2002]。这样,我们可以得到一个更为泛化的感知器:

$$\hat{y} = \underset{y \in \text{Gen}(\mathbf{x})}{\text{arg max }} \mathbf{w}^{\text{T}} \boldsymbol{\phi}(x, y), \tag{4.10}$$

这里Gen(x)表示输入x所有的输出目标集合。当处理C类分类问题时, $Gen(x) = \{1, \dots, C\}$ 。

在上面几节中,分类函数都是在输入x的向量空间上。通过引入特征函数  $\phi(x,y)$ ,感知器不但可以用于多类分类问题,也可以用于结构化学习问题,比 如输出是序列或来其它结构化的形式。

当y为离散变量时  $(y \in \{1, \cdots, C\})$ ,类别也可以表示为向量:

$$\phi(y=c) = \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$$

如果每个样本可以有多个类别,标签分类 $y = \{c, k\}$ 时,类别可以表示为向量:

$$\phi(y = \{c, k\}) = \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \leftarrow 第 c 行$$

$$\vdots \\ \phi(x) = \{c, k\}$$

 $\phi(\mathbf{x}, y)$  可以看成是  $\phi(y)$  和  $\mathbf{x}^{\mathrm{T}}$  的乘积得到矩阵的向量化。

$$\phi(\mathbf{x}, y = c) = \mathbf{vec}(\phi(y)\mathbf{x}^{\mathrm{T}}), \tag{4.11}$$

这里,vec是向量化算子。

4.2 多类感知器 7

多类感知器算法的训练过程如算法4.2所示。

#### 算法 4.2: 多类感知器算法

```
输入: 训练集: (x_i, y_i), i = 1, \dots, N,最大迭代次数: T
   输出: w<sub>1</sub>
 \mathbf{w}_0 = 0;
 2 k = 0:
 3 for t = 1 \cdots T do
       for i = 1 \cdots N do
           选取一个样本(x_i, y_i);
 5
         用公式4.10计算预测类别\hat{y}_i;
         if \hat{y}_i \neq y_i then
 7
              \mathbf{w}_{k+1} = \mathbf{w}_k + (\phi(\mathbf{x}_i, y_i) - \phi(x_i, \hat{y}_i));
               k = k + 1;
            end
10
11
       end
12 end
13 return \mathbf{w}_k;
```

### 4.2.1 多类感知器的收敛性

多类分类时,感知器的收敛情况。Collins [2002] 给出了多类感知器在多类 线性可分的收敛性证明,具体推导过程和两类分类器比较类似。

定义 4.2 – 多类线性可分: 对于训练集  $\mathcal{D} = \{(x_i, y_i)\}_{i=1}^n$ ,如果存在一个正的常数  $\gamma(\gamma > 0)$  和权重向量  $\mathbf{w}^*$ ,并且  $\|\mathbf{w}^*\| = 1$ ,对所有 i 都满足  $\langle \mathbf{w}^*, \boldsymbol{\phi}(x_i, y_i) \rangle - \langle \mathbf{w}^*, \boldsymbol{\phi}(x_i, y) \rangle > \gamma, y \neq y_i$  ( $\boldsymbol{\phi}(x_i, y_i) \in \mathbb{R}^m$  为样本  $x_i, y_i$  的特征向量),那么训练集  $\mathcal{D}$  是线性可分的。

定理 4.2 – 多类感知器收敛性: 对于任何线性可分的训练集  $\mathcal{D} = \{(x_i, y_i)\}_{i=1}^n$ ,假设 R 是所有样本中错误类别和真实类别在特征空

间  $\phi(x,y)$  最远的距离。

$$R = \max_{i} \max_{z \neq y_i} \|\phi(x_i, y_i) - \phi(x_i, z)\|.$$

那么在多类感知器学习算法总共的预测错误次数 $K < \frac{R^2}{\gamma^2}$ 。

# 4.3 投票感知器

从定理4.2可以看出,如果训练数据是线性可分的,那么感知器可以找到一个判别函数来分割不同类的数据。并且如果边际距离越大,收敛越快。但是,感知器并不能保证找到的判别函数是最优的(比如泛化能力高),这样可能导致过拟合。

此外,从感知器的迭代算法可以看出:在迭代次序上排在后面的错误点,比前面的错误点对最终的权重向量影响更大。比如有1,000个训练样本,在迭代100个样本后,感知器已经学习到一个很好的权重向量。在接下来的899个样本上都预测正确,也没有更新权重向量。但是在最后第1,000个样本时预测错误,并更新了权重。这次更新可能反而使得权重向量变差了。

为了这种情况,可以使用"参数平均"的策略来提高感知器的鲁棒性,也叫投票感知器(Voted Perceptron)[Freund and Schapire, 1999]。

投票感知器记录第 k 次更新后得到的权重  $\mathbf{w}_k$  在其后分类中正确分类样本的次数  $c_k$ 。这样最后的分类器形式为(假设输出为0或1):

$$\hat{y} = \operatorname{sign}(\sum_{k=1}^{K} c_k \operatorname{sign}(\mathbf{w}_k^{\mathrm{T}} x)). \tag{4.13}$$

投票感知器虽然提高了感知器的泛化能力,但是需要保存 K 个权重向量。在实际操作中会带来额外的开销。因此,人们经常会使用一个简化的版本,也叫做**平均感知器**(Averaged Perceptron)[Collins, 2002]。

$$\hat{y} = \operatorname{sign}(\sum_{k=1}^{K} c_k(\mathbf{w}_k^{\mathrm{T}} x))$$

$$= \operatorname{sign}((\sum_{k=1}^{K} c_k \mathbf{w}_k)^{\mathrm{T}} x)$$

$$= \operatorname{sign}(\bar{\mathbf{w}}^{\mathrm{T}} x), \tag{4.14}$$

4.3 投票感知器 9

其中, w 为平均的权重向量。

假设 $\mathbf{w}^{t,i}$ 是在第t轮更新到第i个样本时权重向量的值,平均的权重向量 $\bar{\mathbf{w}}$ 也可以写为

$$\bar{\mathbf{w}} = \frac{\sum_{t=1}^{T} \sum_{i=1}^{n} \mathbf{w}^{t,i}}{nT}$$

$$(4.15)$$

这个方法非常简单,只需要在算法4.2中增加一个**w**,并且在处理每一个样本后,更新

$$\bar{\mathbf{w}} = \bar{\mathbf{w}} + \mathbf{w}^{t,i} \tag{4.16}$$

这里要注意的是, $\bar{\mathbf{w}}$ 需要在处理每一个样本时都需要更新,并且 $\bar{\mathbf{w}}$ 和 $\mathbf{w}^{t,i}$ 都是稠密向量。因此,这个操作比较费时。为了提高迭代速度,有很多改进的方法,让这个更新只需要在错误预测发生时才进行更新。

算法4.3给出了一个改进的平均感知器算法的训练过程[Daumé III]。

#### 算法 4.3: 平均感知器算法

```
输入: 训练集: (x_i, y_i), i = 1, \dots, N,最大迭代次数: T
    输出: 👿
 1 \ \mathbf{w} = 0;
 {\bf u} = 0:
 c = 0:
 4 for t = 1 \cdots T do
         for i = 1 \cdots N do
             选取一个样本(x_i, y_i);
             用公式4.10计算预测类别\hat{y}_t;
             if \hat{y}_t \neq y_t then
                  \mathbf{w} = \mathbf{w} + ((x_t, y_t) - (x_t, \hat{y}_t));
                  \mathbf{u} = \mathbf{u} + c \cdot ((x_t, y_t) - (x_t, \hat{y}_t));
10
              end
11
             c = c + 1;
12
         end
13
14 end
15 \bar{\mathbf{w}} = \mathbf{w}_T - \frac{1}{c}\mathbf{u};
16 return \bar{\mathbf{w}}:
```

## 4.4 总结和深入阅读

Rosenblatt [1958] 最早提出了两类感知器算法,并随后给出了感知机收敛定理。但是感知器的输出是离散的以及学习算法比较简单,不能解决线性不可分问题,限制了其应用范围。Minsky and Seymour [1969] 分析了感知机的局限性,证明感知机不能解决非常简单的异或(XOR)问题。虽然他也认为多层的网络可以解决非线性问题,但是遗憾的是,在当时这个问题还不可解。直到1980年以后,Geoffrey Hinton、Yann LeCun等人用连续输出代替离散的输出,并将反向传播算法(Backpropagation,BP)[Werbos, 1974] 引入到多层感知器[Williams and Hinton, 1986],人工神经网络才又重新引起人们的注意。Minsky and Papert [1987] 也修正之前的看法。

另外一方面,人们对感知器本身的认识也在不断发展。Freund and Schapire [1999] 提出了使用核技巧改进感知器学习算法,并用投票感知器来提高泛化能力。Collins [2002] 将感知器算法扩展到结构化学习,给出了相应的收敛性证明,并且提出一种更加有效并且实用的参数平均化策略。[McDonald et al., 2010] 又扩展了平均感知器算法,使得感知器可以在分布式计算环境中并行计算,这样感知器可以用在大规模机器学习问题上。

# 参考文献

Michael Collins. Discriminative training methods for hidden markov models: Theory and experiments with perceptron algorithms. In *Proceedings of the 2002 Conference on Empirical Methods in Natural Language Processing*, 2002.

Hal Daumé III. A course in machine learning. http://ciml.info/. [Online].

Yoav Freund and Robert E Schapire. Large margin classification using the perceptron algorithm. *Machine learning*, 37(3):277–296, 1999.

Ryan McDonald, Keith Hall, and Gideon Mann. Distributed training strategies for the structured perceptron. In Human Language Technologies: The 2010 Annual Conference of the North American Chapter of the Association for Computational Linguistics, pages 456–464. Association for Computational Linguistics, 2010.

Marvin Minsky and Papert Seymour. Perceptrons. 1969.

Marvin L Minsky and Seymour A Papert. Perceptrons - Expanded Edition: An Introduction to Computational Geometry. MIT press Boston, MA:, 1987.

Albert BJ Novikoff. On convergence proofs for perceptrons. Technical report, DTIC Document, 1963.

F. Rosenblatt. The perceptron: A probabilistic model for information storage and organization in the brain. *Psychological review*, 65(6):386–408, 1958.

Paul Werbos. Beyond regression: New tools for prediction and analysis in the behavioral sciences. 1974.

DE Rumelhart GE Hinton RJ Williams and GE Hinton. Learning representations by back-propagating errors. *Nature*, pages 323–533, 1986.