

Project 1 of NNDL

Linyang He (15307130240)

2018 年 10 月 30 日

1 问题

理论和实验证明, 一个两层的 ReLU 网络可以模拟任何函数. 请自行定义一个函数, 并使用基于 ReLU 的神经网络来拟合此函数.

2 证明

问题中的描述并不准确. 首先, “模拟”一词含义也不清晰, 笔者默认为问题的意思是“拟合”. 此外, 一个两层的 ReLU 网络并不能“模拟”任何函数. 根据 Hornik et al., 1989, 我们注意到原文中提到: “This paper rigorously establishes that standard multilayer feedforward networks with as few as one hidden layer using arbitrary squashing functions are capable of approximating any **Borel measurable** function from one finite dimensional space to another to any desired degree of accuracy, provided sufficiently many hidden units are available.” 可见并不是所有的函数都是可以 approximate 的, 而只是对博雷尔可测 (Borel measurable) 函数. 于是我们将问题修改为: 一个两层的 **ReLU** 网络可以拟合任何博雷尔可测函数.

根据 Universal Approximator Theorem, 我们有:

定理 $\varphi(\cdot)$ 是一个有界且连续的单调上升函数, 且 $\varphi(\cdot)$ 不恒为常数, 令 I_m 是 R^m 的一个紧子集, 那么 $\forall \varepsilon > 0, f \in C(I_m), \exists N \in N, v_i, b_i \in R, w_i \in R^m, (i = 1, 2, \dots, N)$, 使得可以定义 $F(x) = \sum_{i=1}^N v_i \varphi(w_i^T x + b_i)$, 满足 $|F(x) - f(x)| < \varepsilon$ 对 $\forall x \in I_m$ 成立.

注意到对于单独的一层 ReLU 网络,ReLU 函数并不满足 $\varphi(\cdot)$ 是一个有界且连续的单调上升函数的条件. 于是, 对于 ReLU 网络, 我们可以构造:

$$\varphi'(x) = \text{ReLU}(x - a) - \text{ReLU}(x - b), (a < b)$$

可以发现 $\varphi'(x) = 0$, $\varphi'(x) = \lim_{x \rightarrow +\infty} [(x - a) - (x - b)] = b - a$. 此时, φ' 有界、连续且单调, 满足 Universal Approximator Theorem. 于是我们可以定义: $F(x) = \sum_{i=1}^N v_i \varphi'(w_i^T x + b_i)$, 满足 $|F(x) - f(x)| < \varepsilon$ 对 $\forall x \in I_m$ 成立. φ' 是两个 ReLU 函数的线性组合, 可以通过两层的 ReLU 网络构造, 这样就证明了一个两层的 ReLU 网络可以拟合任何博雷尔可测函数.

3 实现

3.1 函数定义

我们以一个实际的一元二次函数为例子.

$$y = 2x^2 + 3x, x \in R$$

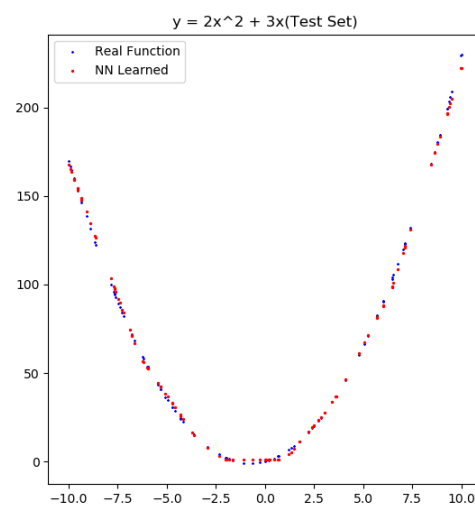
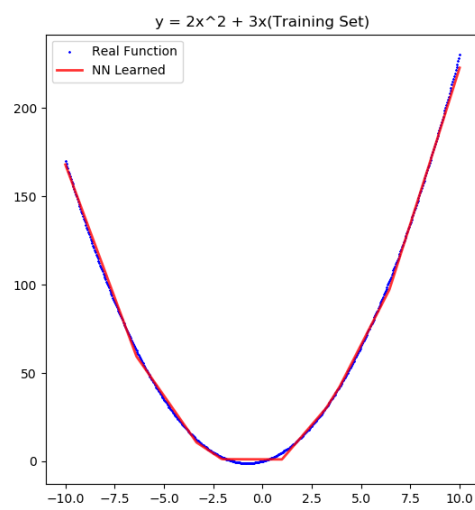
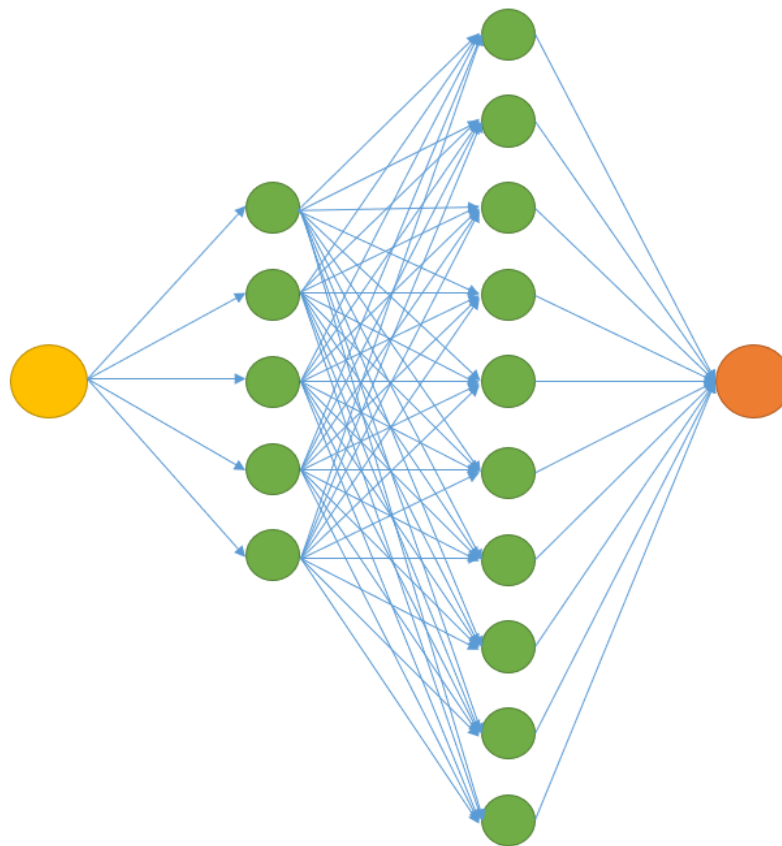
在构建函数的时候, 我们可以用 $[-10, 10]$ 上的均匀分布的 500 个点来表示. 同时这也是我们的训练集. 对于测试集, 我们另取 $[-10, 10]$ 上随机分布的 100 个点.

3.2 模型表述

对于神经网络模型, 我们构造了两层 hidden layer 激活函数均是 ReLU 的网络. 输入层 1 个节点 (x), 第一层隐藏层 5 个节点, 第二层隐藏层 10 个节点, 输出层 1 个节点 (y). 此外, 对于网络的 optimizer, 我们选用了随机梯度下降 (SGD), learning rate 为 0.0001. 损失函数选取的是均方差 MSE. 神经网络下图所示.

3.3 拟合效果

对于训练好的网络, 我们发现, 对于测试集相对误差 (下文会提到) Relative error 为 $9.95e-07$. 而对于测试集 Relative error 是 $4.79e-06$. 神经网络在测试集表现地非常好, 从数据和图中都可以看出, 神经网络确实很好的拟合了 $y = 2x^2 + 3x$ 这个函数.



3.4 实验分析

对于隐藏层结点个数选择，我们根据经验公式：

$$h = \sqrt{m + n} + a$$

这里，h 为隐藏层节点个数，m 为输入层节点个数，n 为输出层节点个数，a 为 1-10 的常数。这样，我们的 10 和 5 的节点数是较为合理的。

在训练中，为了提升训练速度，我们希望在 loss 值变化非常小的时候（意味着几乎到达了最优解），能够提早结束训练。考虑到归一化的原因，我们定义相对误差 (Relative Error) 为：

$$RelError = \frac{MSE}{||y||^2} = \frac{\frac{1}{n} \sum_{i=1} (y_i - \hat{y}_i)^2}{||y||^2}$$

且规定当相对误差小于 1e-6 的时候，训练提早结束。实验发现，对于原本 20000 步 epochs 的训练，可以在第 10356 次迭代时后结束训练，极大地提升了神经网络的效率。