神经元网络

高　阳, 李文斌

http://cs.nju.edu.cn/rl, 2022.3.7

大纲

多层感知机 MLP

自动编码器 AUTOENCODER

径向基网络 RBF

大纲

多层感知机 MLP

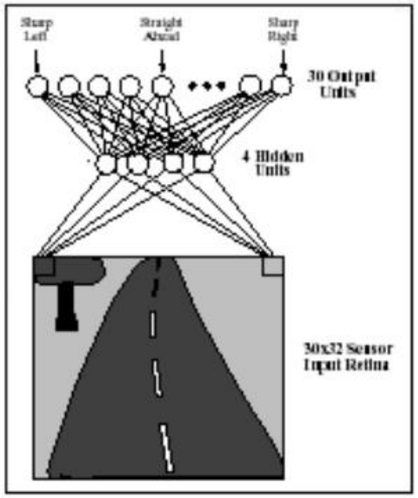
- 回顾
- 反向传播
- 其他议题

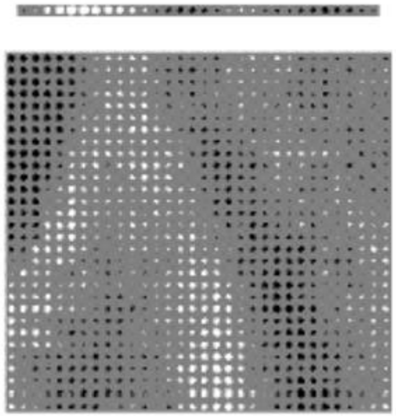
自动编码器 AUTOENCODIER

径向基网络 RBF

回顾

- ALVINN : **A**utonomous **L**and **V**ehicle **I**n a **N**eural **N**etwork

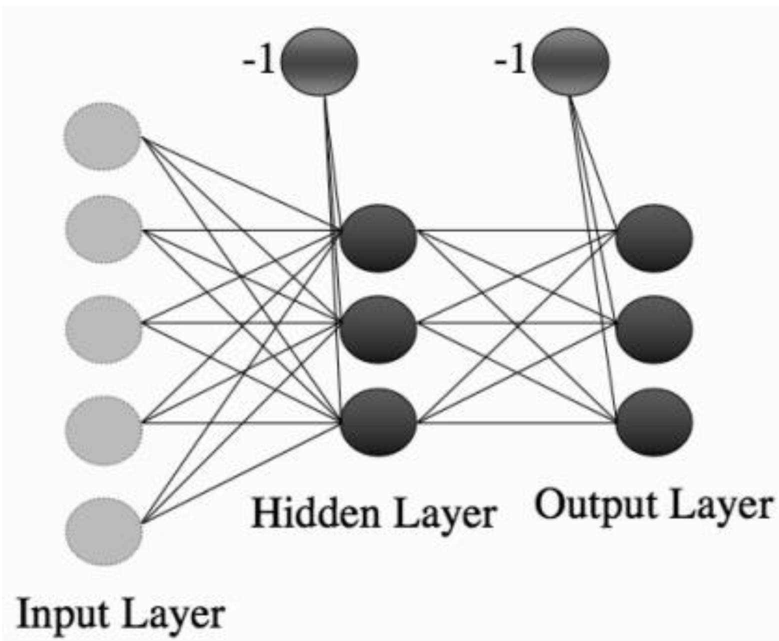


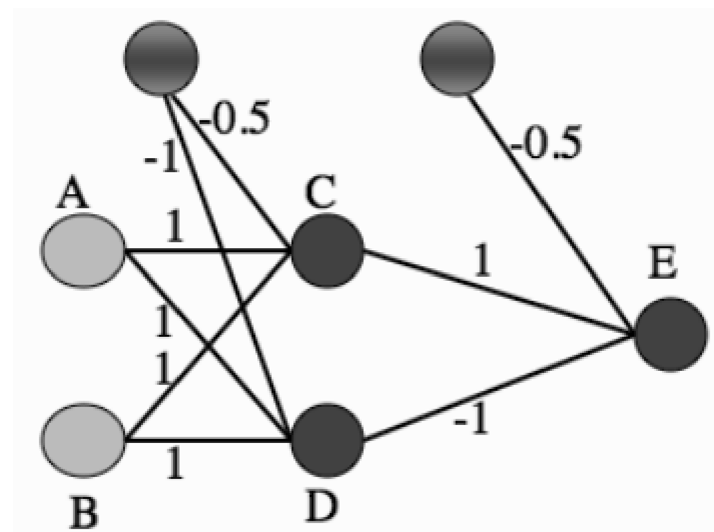


- 1993年，CMU研发
- 输入：30*32的像素
- 4个隐藏节点
- 输出：30个驾驶动作(急剧左转、急剧右转，正前方行进……)

有向/无向？有环/无环？结构？多层(浅/深)？

回顾

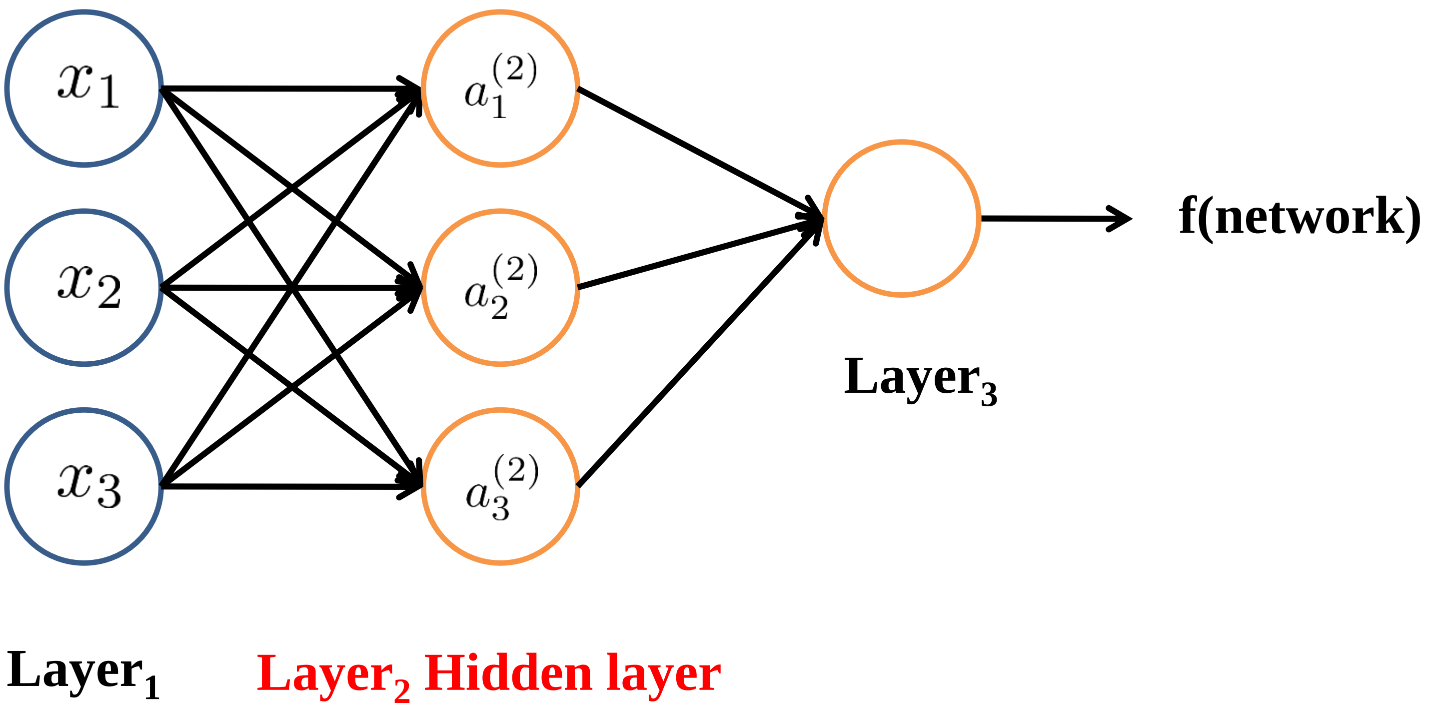




多层感知器网络

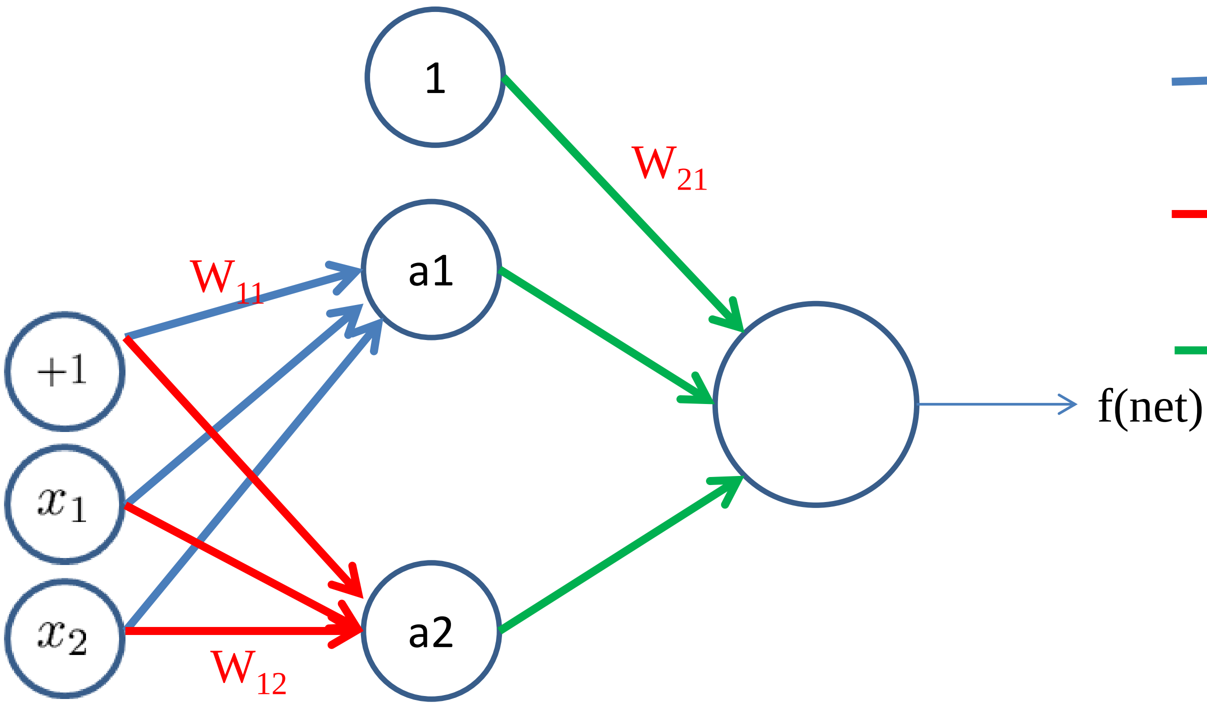
解决XOR的多层感知器网络权值

多层感知机



x_1
x_2
x_3
$a_1^{(2)}$
$a_2^{(2)}$
$a_3^{(2)}$
f(network)
Layer_3
Layer_1
Layer_2 Hidden layer

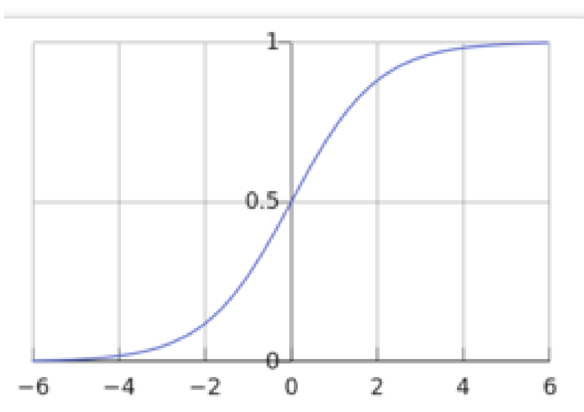
多层感知机



W_{11}=[-30,20,20]

W_{12}=[10,-20,-20]

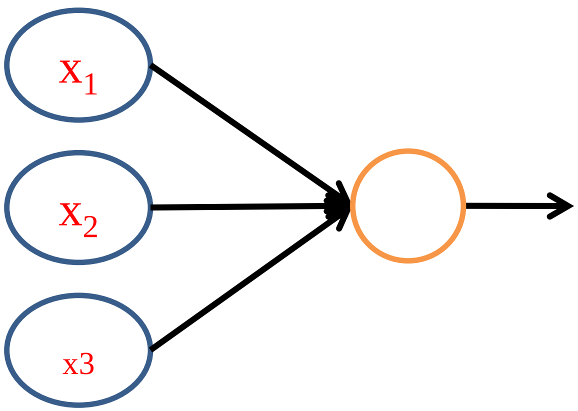
W_{21}=[10,-20,-20]

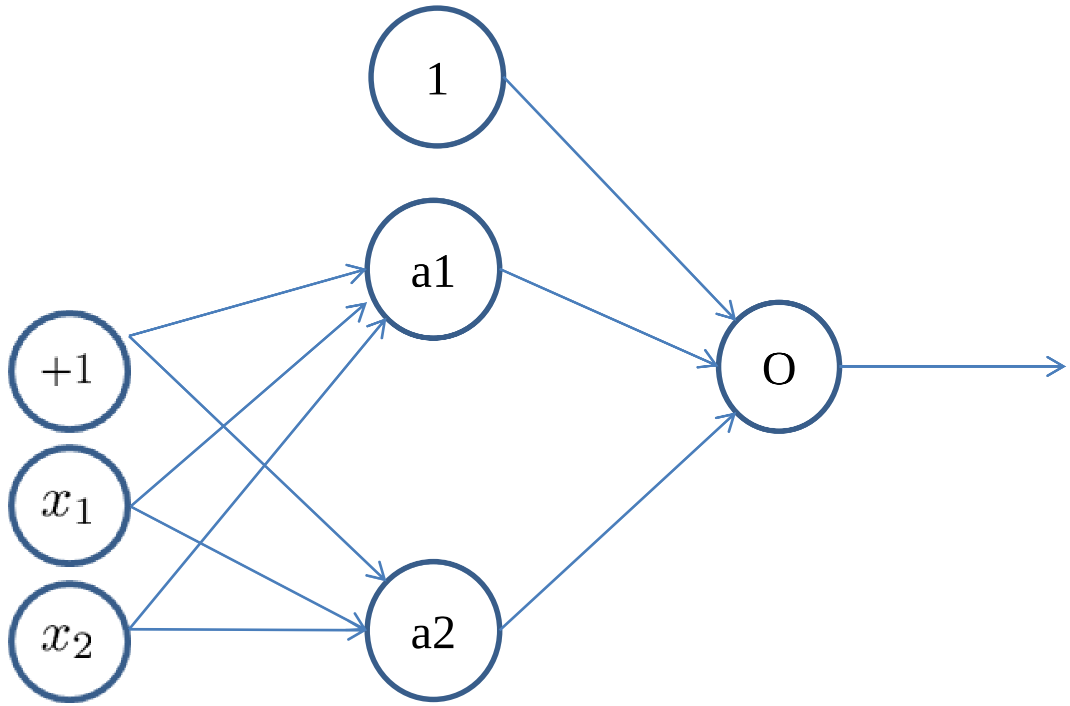


x_1	x_2	$a_1^{(2)}$	$a_2^{(2)}$	f(net)
0	0	0	1	0
0	1	0	0	1
1	0	0	0	1
1	1	1	0	0

多层感知机的隐层

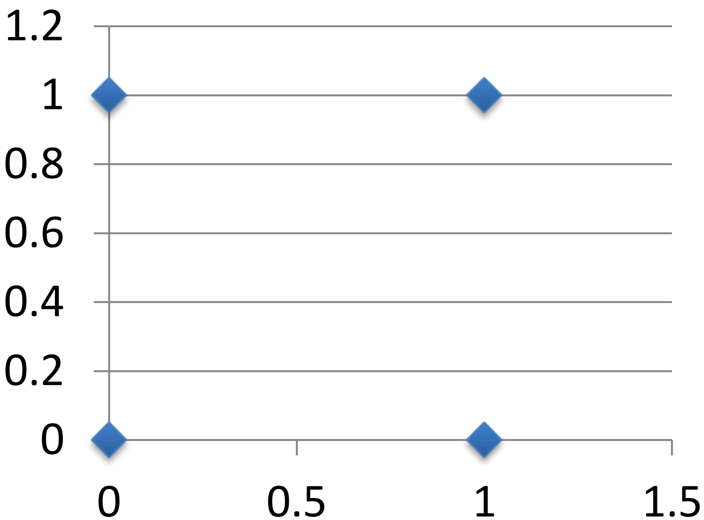
为什么要使用隐层神经元



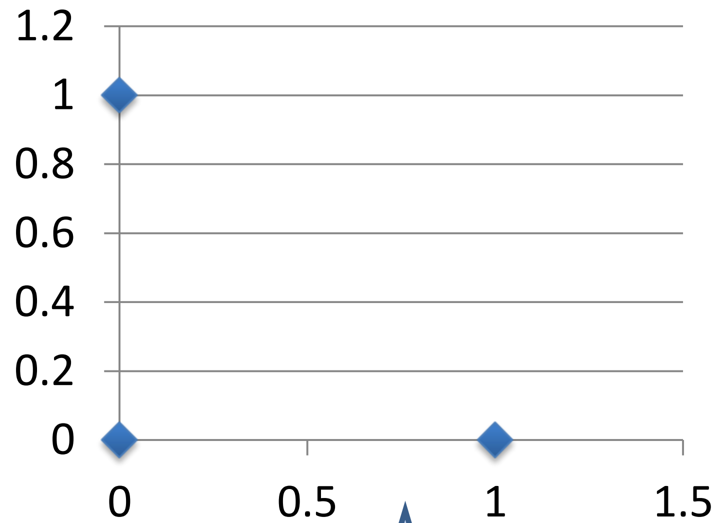


Q1:为什么需要隐藏层？

Q2:如何计算隐藏层的权值？



单层神经网络的特征空间

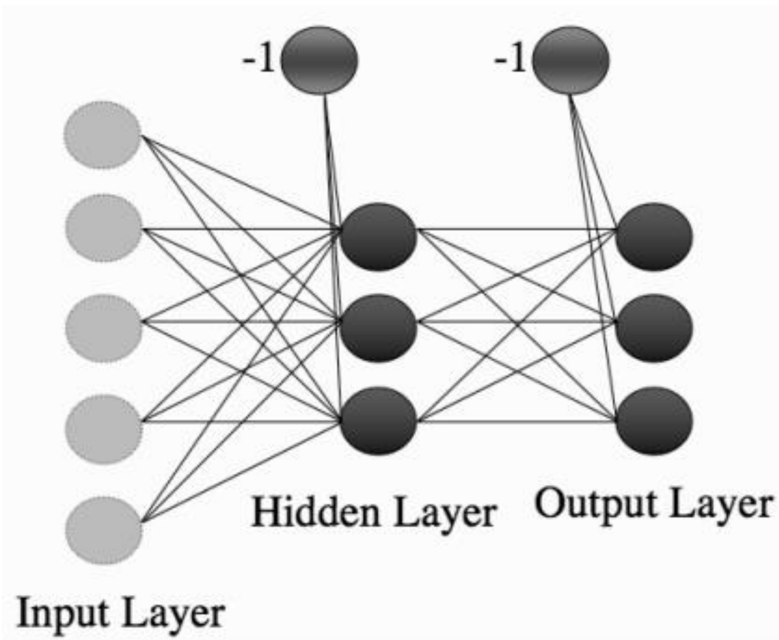


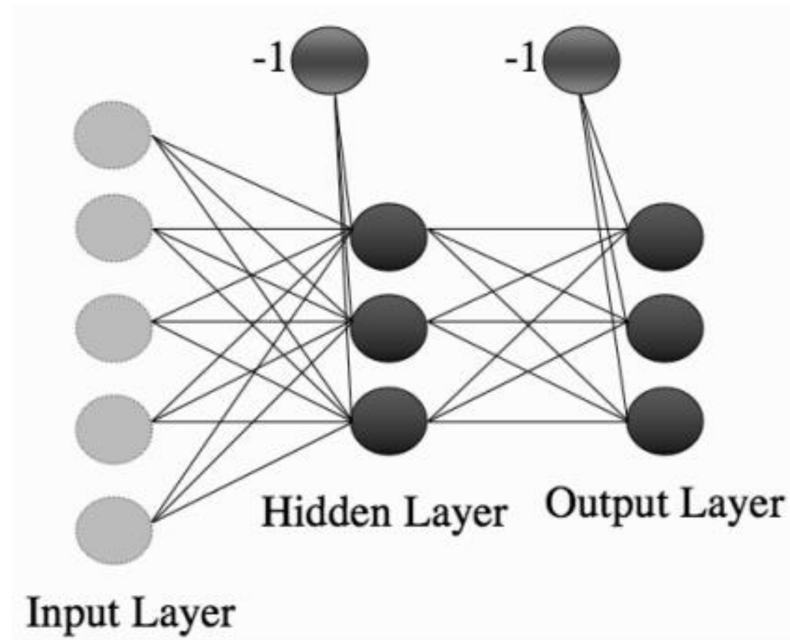
多层神经网络隐层处理后的特征空间

隐藏层神经元实际为特征检测算子(feature detector)，在多层神经网络的学习过程中，隐藏层神经元开始逐步“发现”刻画训练数据的突出特征。

0	0	0	1	0
0	1	0	0	1
1	0	0	0	1
1	1	1	0	0

工作机制：向前和向后





计算误差

向前：分阶段，

逐层计算输入和输出

向后：分阶段，

逐层调整权值

大纲

多层感知机MLP

- 回顾
- 反向传播
- 其他议题

自动编码器AUTOENCODING

径向基网络RBF

向后：误差的反向传播

- 误差反传(Back-propagation of error)要素
  - ✓ 误差定义
  - ✓ Delta规则
  - ✓ 激活函数
  - ✓ 反传学习的推导(链式法则)

误差定义

经典感知机中$N=1$

- 感知器

$$\sum_{k=1}^{N} E_k = \sum_{k=1}^{N} (y_k - t_k)$$

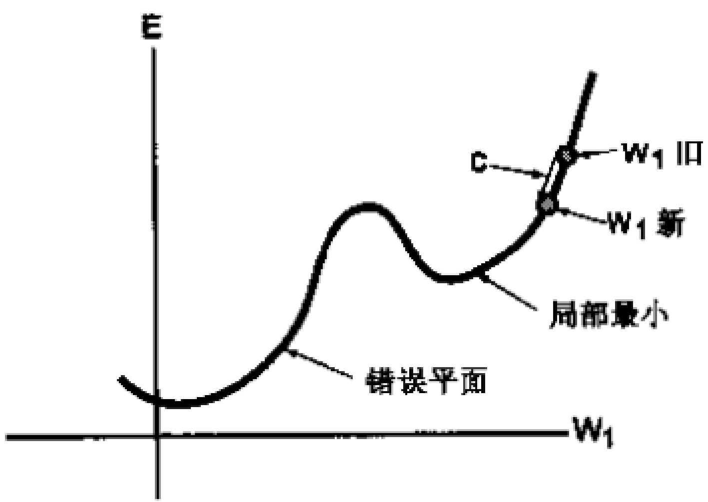
- 多层感知机(BP神经网络)

$$E(\mathbf{t},\mathbf{y}) = \frac{1}{2}\sum_{k=1}^{N} (y_k - t_k)^2$$

$\frac{1}{2}$非必须

Delta规则

- Delta规则是基于误差平面的。
- 误差平面是神经网络所表示的函数在(训练)数据集上的累积误差。每一个神经网络权值向量都对应误差平面中的一个点。
- 应用delta规则时，激励函数必须是连续的和可微分的。



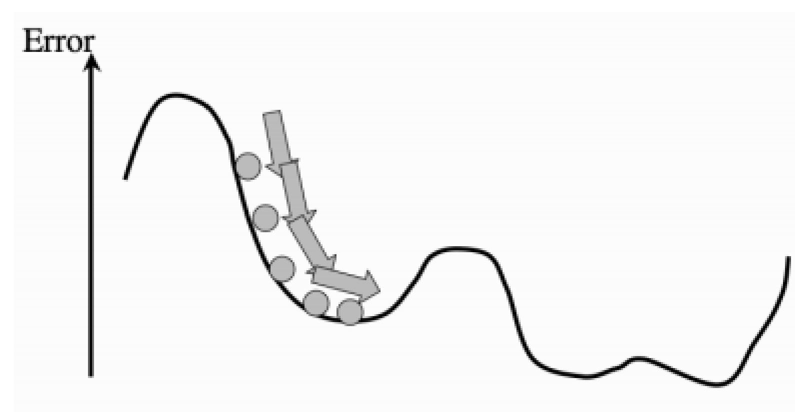


图 10-8　二维坐标中的错　　　常数 c 指示了学习步幅的大小

Delta规则

$$Error = \frac{1}{2}\sum_i (d_i - O_i)^2 \quad \Rightarrow \quad \vec{o}(\vec{x}) = f(\vec{w}\cdot\vec{x})$$

$$\Delta W_k = -c\frac{\partial Error}{\partial W_k} = -c\frac{\partial Error}{\partial O_i} * \frac{\partial O_i}{\partial W_k}$$

此页符号标记前后有差异，
学习时请注意

$$\frac{\partial Error}{\partial O_i} = \frac{\partial(\frac{1}{2}\sum_i (d_i - O_i)^2)}{\partial O_i} = \frac{\partial \frac{1}{2} * (\mathrm{d}_i - \mathrm{O}_i)^2}{\partial O_i}$$

因为输出层中的节点的误差并不影响其他节点，因此

$$\boxed{\frac{\partial \frac{1}{2} * (\mathrm{d}_i - \mathrm{O}_i)^2}{\partial O_i} = -(\mathrm{d}_i - \mathrm{O}_i)}$$

与感知机调节权值方法一致！

Delta规则

$$\frac{\partial O_i}{\partial W_k} = X_k * f'(W_i X_i) = f'(\text{net}_i) * X_k$$

$$\Rightarrow \quad \vec{o}(\vec{x}) = f(\vec{w} \cdot \vec{x})$$

$$\Delta W_k = -c * [-(d_i - O_i) * f'(\text{net}_i) * X_k]$$

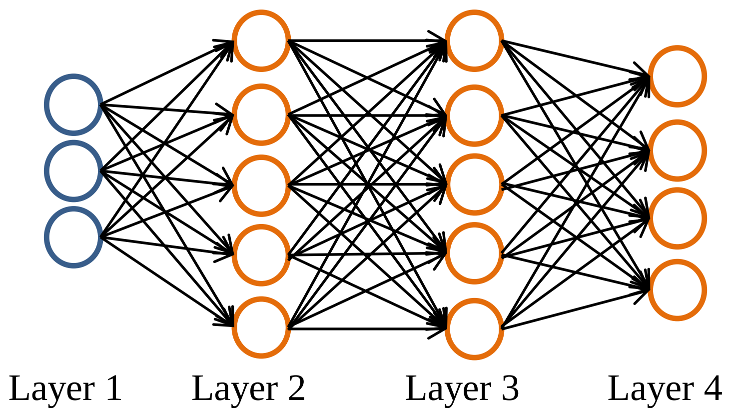
$$= c(d_i - O_i) \boxed{f'(\text{net}_i)} * X_k$$

思考与感知机学习规则的区别！

Delta规则分析

- 学习常数c对delta规则的性能有很重要的影响，c决定了在一步学习过程中权值变化的快慢，c越大，权值朝最优值移动的速度越快。然而，c过大会越过最优值或在最优值附近震荡。
- 尽管delta规则本身不能克服单层神经网络的局限，但是它的一般形式是误差反传算法(BP)的核心，反传算法是多层神经网络中的学习算法。

误差传播



误差可通过连续的网络层，以复杂的不可预测的方式传播和变化

推导所使用的数学技巧

第一个就是对$\frac{1}{2}x^2$求导（对x），它是x；

第二个是链式法则，即$\frac{dy}{dx} = \frac{dy}{dt}\frac{dt}{dx}$；

第三个是：$\frac{dy}{dx} = 0$如果y不是x的函数。

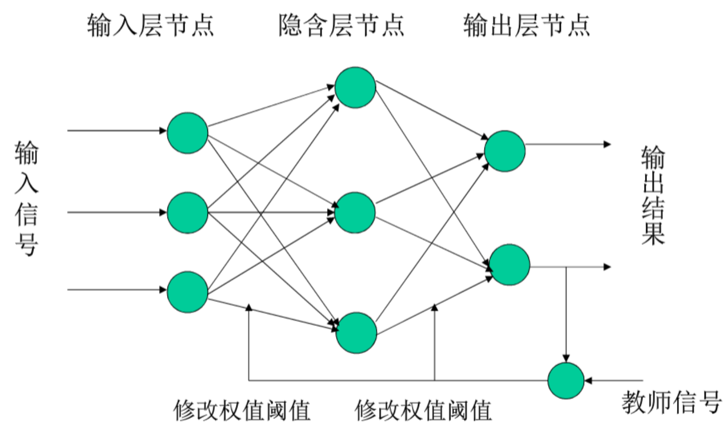
反向传播算法Back Propagation

- 前向阶段：网络突触的权值固定，输入信号在网络中正向一层一层传播，直到到达输出端，获得网络的输出。
- 反向阶段：通过比较网络的输出与期望输出，产生一个误差信号。误差信号通过网络反向一层一层传播，在传播过程中对网络突触的权值进行修正。
- 信用分配 Credit assignment (机器学习中的核心难题)
  - ✓ 对于输出层的权值修正计算是直接的，因为输出层对于外部世界可见，可以提供一个期望响应来指导神经元的行为。
  - ✓ 在修正隐藏层的权值时，如何给隐藏层的神经元分配信用或者责任呢？

多层感知机→BP神经网络

◘BP神经网络

- ✓三层或三层以上结构
- ✓无反馈
- ✓层内无互连
- ✓输入层+输出层+隐含层
- ✓采用<u>误差反向传播学习</u>算法

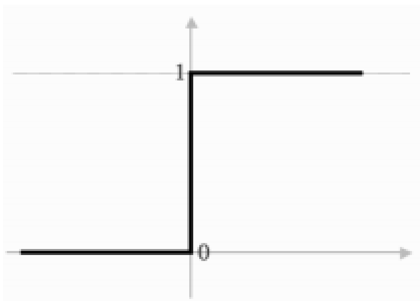


BP本质是学习算法，被广泛应用到MLP, ADE, KBF, DNN中。

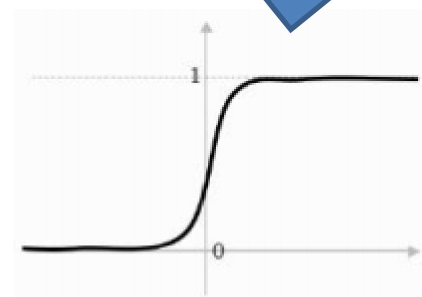
但很多时候，又把MLP称为BP神经网络。

激励函数

饱和型函数



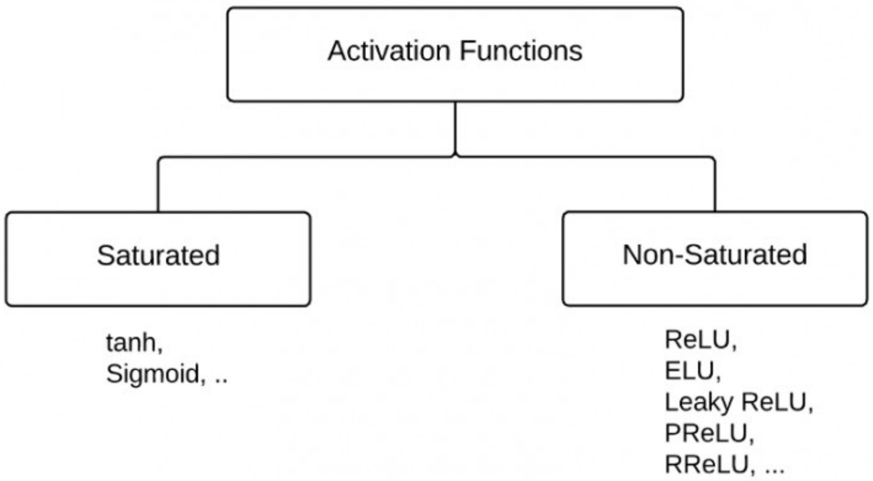
感知机中所使用的阶跃函数



BP神经网络中所常用的Sigmod函数

$$a = g(h) = \frac{1}{1 + \exp(-\beta h)}$$

激励函数的分类

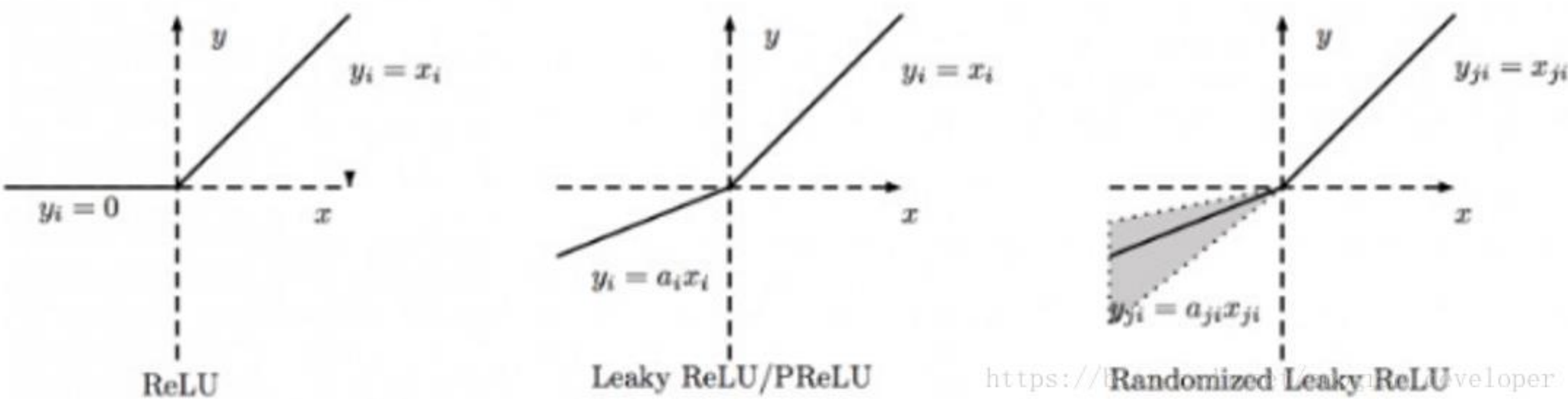


饱和型激励函数的缺点：

1、梯度消失

2、非以0为中心

3、指数计算代价大



BP误差反传学习推导

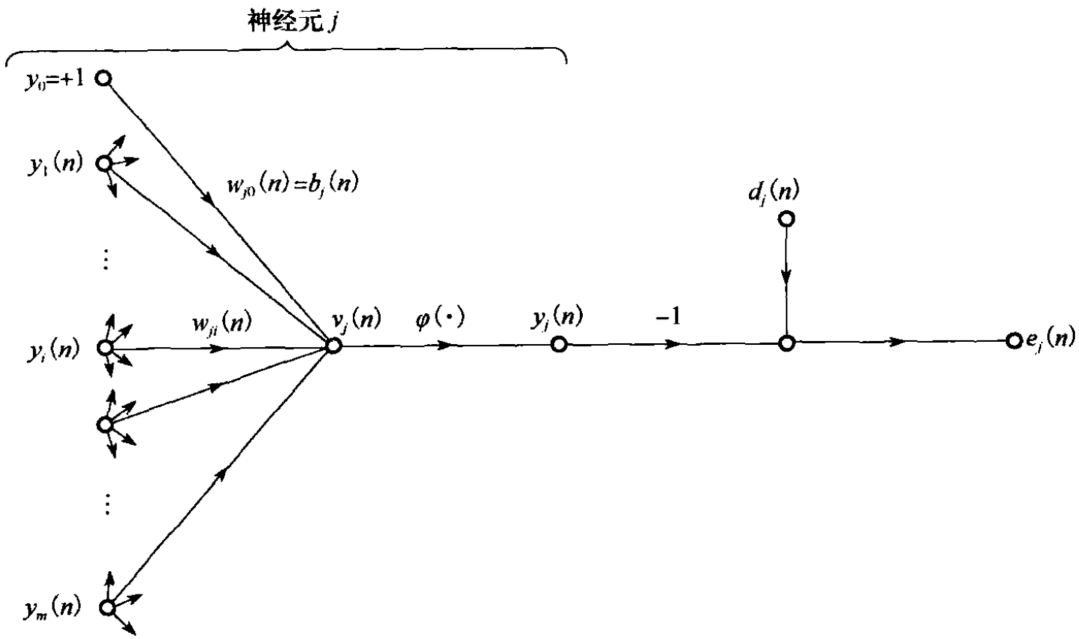
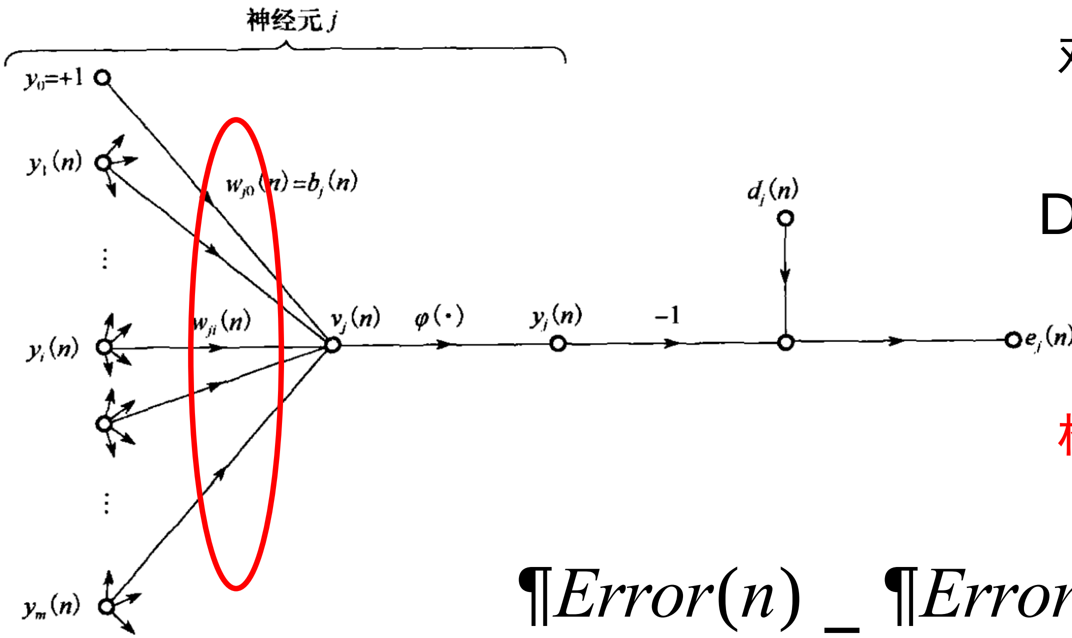


图 解

- ✓ y_i 第j个神经元的第i个输入
- ✓ n 第n个训练样本
- ✓ j 第j个神经元
- ✓ w_{ji} 第j个神经元和第i个输入间的权值
- ✓ v 输入加权和
- ✓ Φ 激活函数
- ✓ y_j第j个神经元的输出
- ✓ d 样本真实值
- ✓ e 误差值

后续推导符号标记与教材4.6节有差异，学习时请注意

突触权值修正



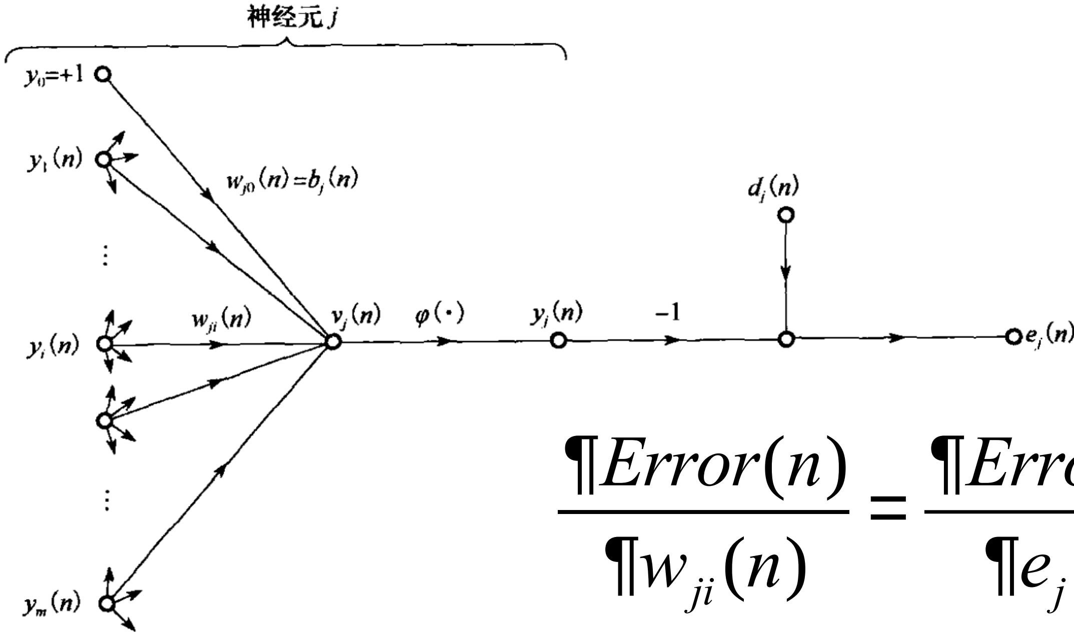
对突触权值$w_{ji}(n)$应用修正值$\Delta w_{ji}(n)$

$$\Delta w_{ji}(n) = -\alpha(\partial Error(n) / \partial w_{ji}(n))$$

根据链式规则

$$\frac{\partial Error(n)}{\partial w_{ji}(n)} = \frac{\partial Error(n)}{\partial e_j(n)} \frac{\partial e_j(n)}{\partial y_j(n)} \frac{\partial y_j(n)}{\partial v_j(n)} \frac{\partial v_j(n)}{\partial w_{ji}(n)}$$

偏导数代表一个敏感因子，决定了突触权值w_{ji}在权值空间的搜索方向。



此例权值下标ji

表示是由第i个节点连向第j个节点

$$\frac{\partial Error(n)}{\partial w_{ji}(n)} = \frac{\partial Error(n)}{\partial e_j(n)} \frac{\partial e_j(n)}{\partial y_j(n)} \frac{\partial y_j(n)}{\partial v_j(n)} \frac{\partial v_j(n)}{\partial w_{ji}(n)}$$

对于误差的定义

$$Error(n) = \frac{1}{2}\sum_j (d_j(n) - y_j(n))^2 = \frac{1}{2}\sum_j e_j(n)^2$$

神经元j输出的函数信号

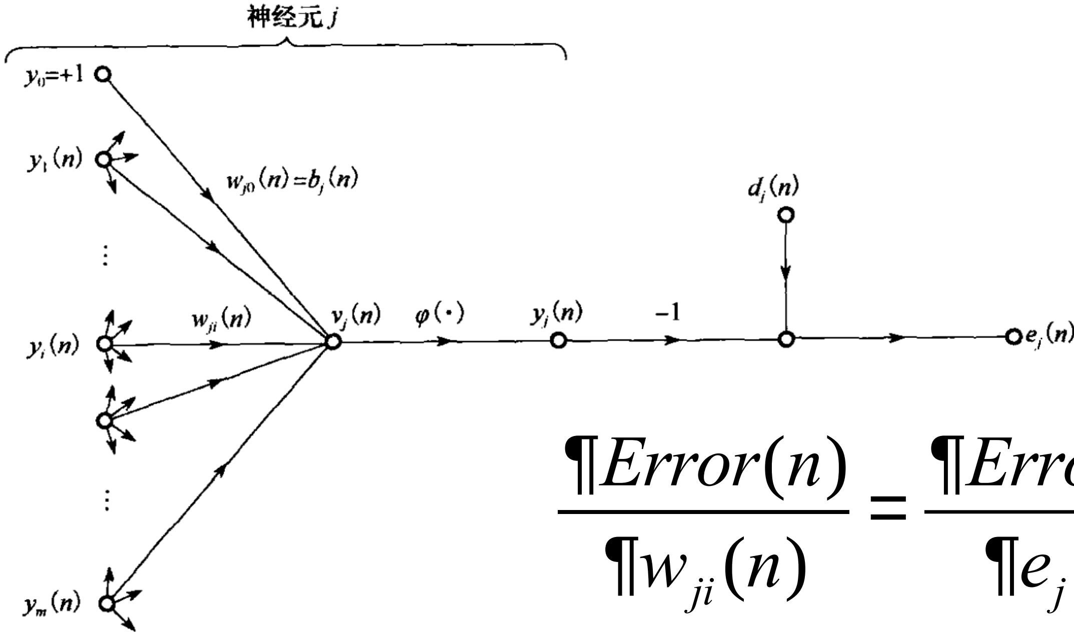
$$y_j(n) = \varphi_j(v_j(n))$$

对于误差的定义

$$e_j(n) = (d_j(n) - y_j(n))$$

诱导局部域

$$v_j(n) = \sum_{i=0}^{m} w_{ji}(n) y_i(n)$$



$$\frac{\partial Error(n)}{\partial w_{ji}(n)} = \frac{\partial Error(n)}{\partial e_j(n)} \frac{\partial e_j(n)}{\partial y_j(n)} \frac{\partial y_j(n)}{\partial v_j(n)} \frac{\partial v_j(n)}{\partial w_{ji}(n)}$$

因此我们可以得到

$$\frac{\partial Error(n)}{\partial e_j(n)} = e_j(n)$$

$$\frac{\partial e_j(n)}{\partial y_j(n)} = -1$$

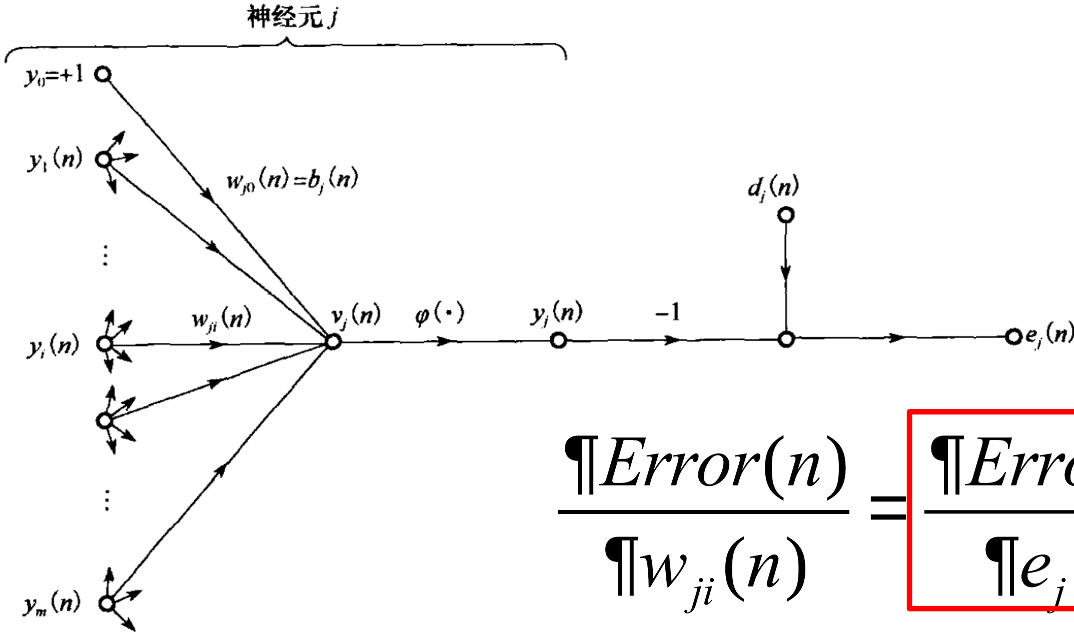
$$\frac{\partial y_j(n)}{\partial v_j(n)} = \varphi_j'(v_j(n))$$

$$\frac{\partial v_j(n)}{\partial w_{ji}(n)} = y_i(n)$$

因此可求的偏导数为

$$\frac{\partial Error(n)}{\partial w_{ji}(n)} = -e_j(n)\varphi_j'(v_j(n))y_i(n)$$

和Delta规则没区别



$$\frac{\partial Error(n)}{\partial w_{ji}(n)} = \boxed{\frac{\partial Error(n)}{\partial e_j(n)} \frac{\partial e_j(n)}{\partial y_j(n)} \frac{\partial y_j(n)}{\partial v_j(n)}} \frac{\partial v_j(n)}{\partial w_{ji}(n)}$$

定义局域梯度$delta_j(n)$

$$delta_j(n) = -\frac{\partial Error(n)}{\partial v_j(n)}$$

因此权值修正定义为

$$\boxed{\Delta w_{ji}(n) = \alpha * delta_j(n) * y_i(n)}$$

权值修正的两种情况

- Case1: 神经元j是输出层节点

$$\Delta w_{ji}(n) = \alpha * delta_j(n) * y_i(n)$$

求解局域梯度$delta_j(n)$:

$$delta_j(n) = -\frac{\partial Error(n)}{\partial v_j(n)} = -\frac{\partial Error(n)}{\partial e_j(n)}\frac{\partial e_j(n)}{\partial y_j(n)}\frac{\partial y_j(n)}{\partial v_j(n)} = e_j(n)\varphi_j'(v_j(n))$$

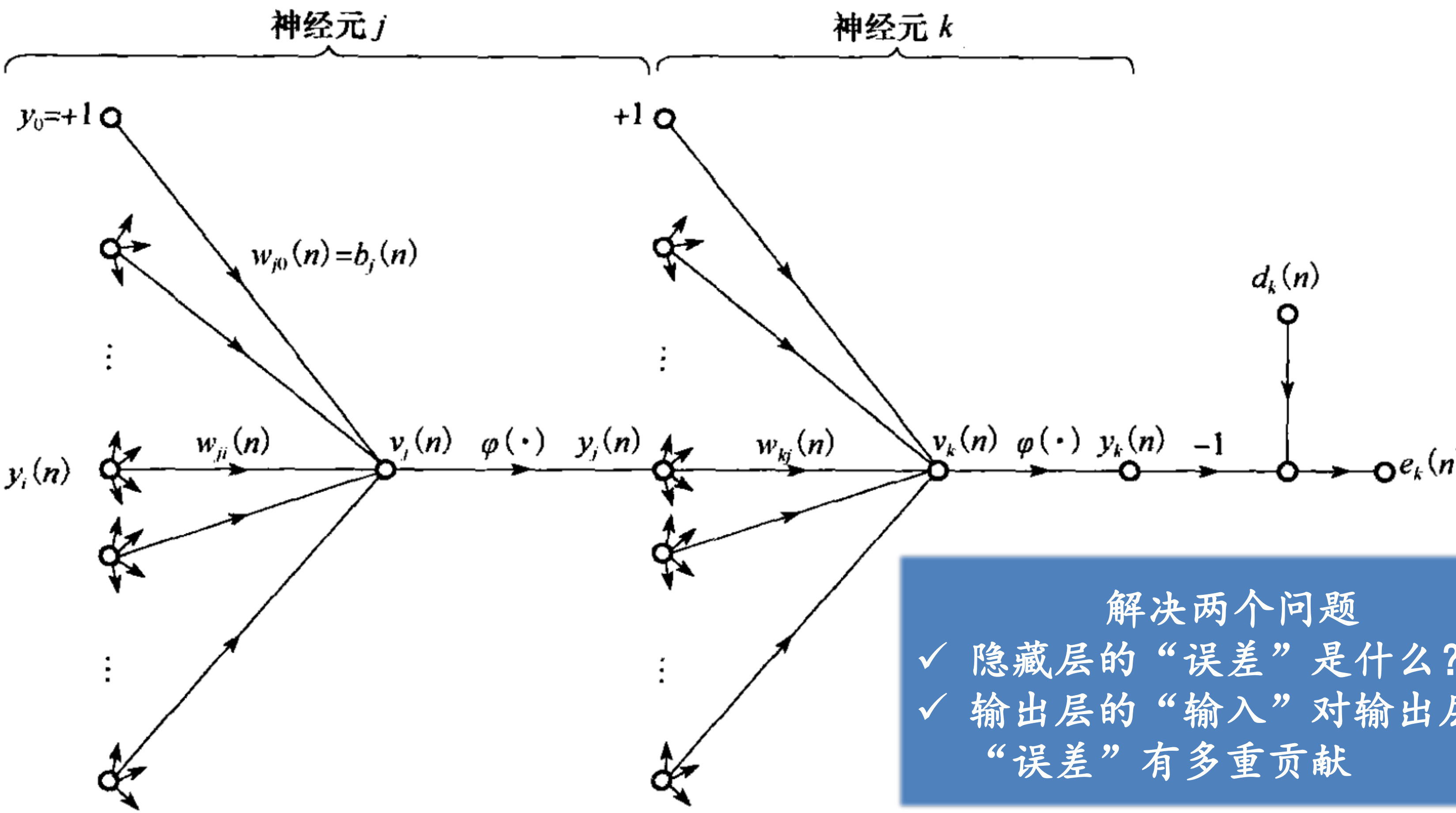
因此权值修正值为:

$$\Delta w_{ji}(n) = \alpha * e_j(n) * \varphi_j'(v_j(n)) * y_i(n)$$

神经元是隐藏层节点

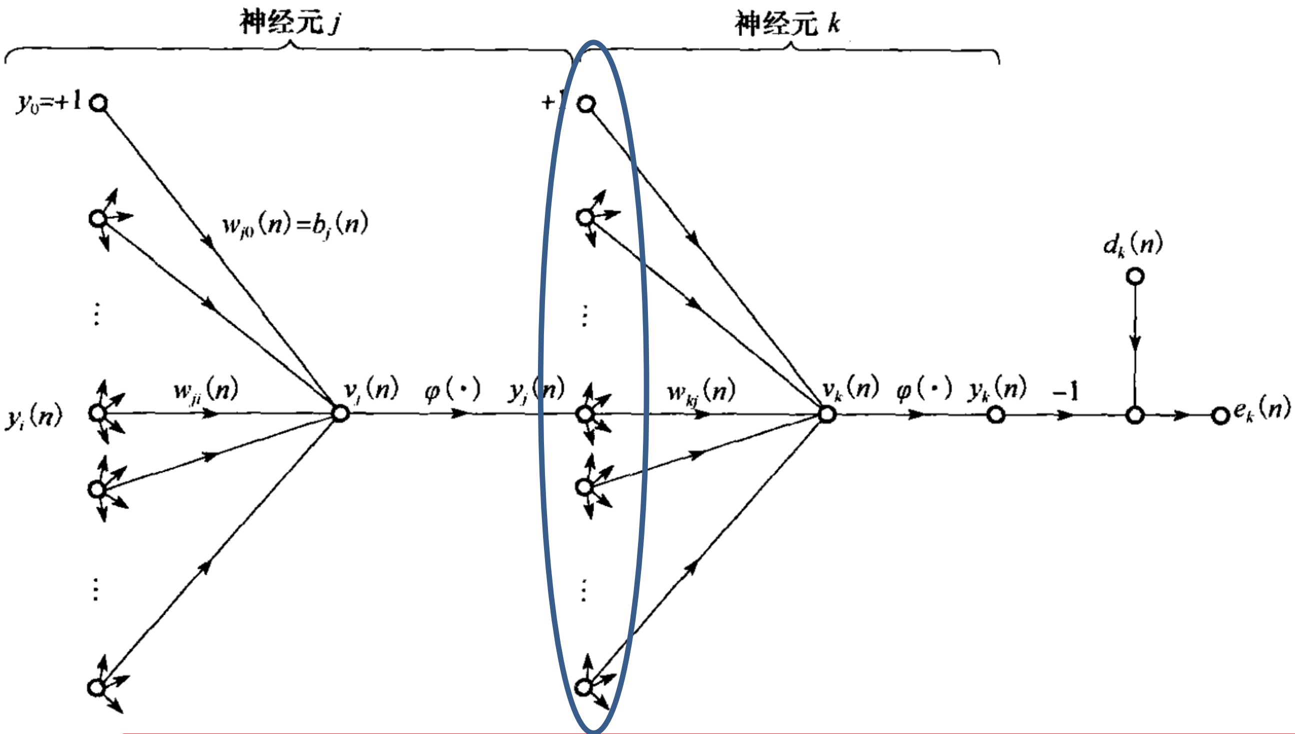
◻ Case2: 神经元j是隐藏层节点

当神经元 j 位于网络隐藏层时，就没有对于神经元的指定期望输出。



解决两个问题

- ✓ 隐藏层的“误差”是什么？
- ✓ 输出层的“输入”对输出层的“误差”有多重贡献



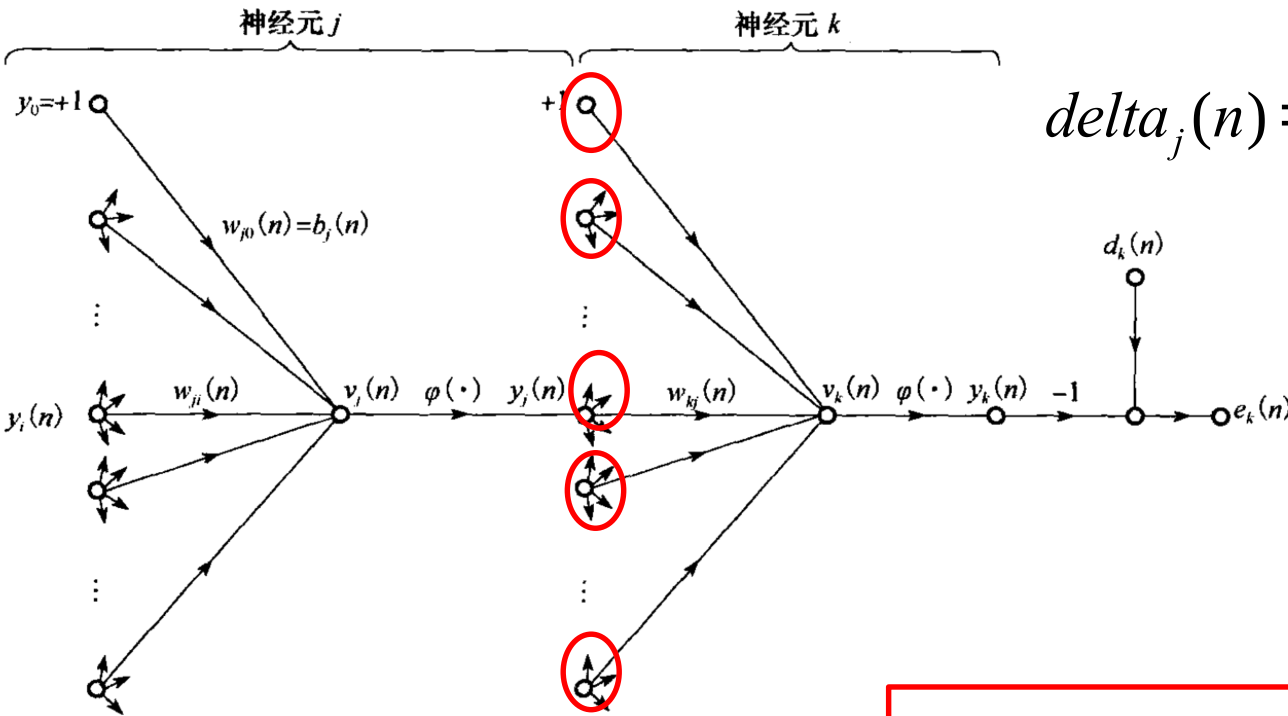
隐藏层神经元不能直接访问，但是它们必须分担对网络输出的误差责任。

如何分配这种共担的责任，就是<u>信用分配问题</u>。

重新求解局域梯度$delta_j(n)$

注意分子部分

$$delta_j(n) = -\frac{\partial Error(n)}{\partial v_j(n)} = -\frac{\partial Error(n)}{\partial y_j(n)}\frac{\partial y_j(n)}{\partial v_j(n)} = \boxed{-\frac{\partial Error(n)}{\partial y_j(n)}}\varphi_j'(v_j(n))$$



$$delta_j(n) = -\frac{\partial Error(n)}{\partial y_j(n)}\varphi_j'(v_j(n))$$

计算隐藏层神经元j，对网络输出层神经元k(有若干个k)的误差的责任

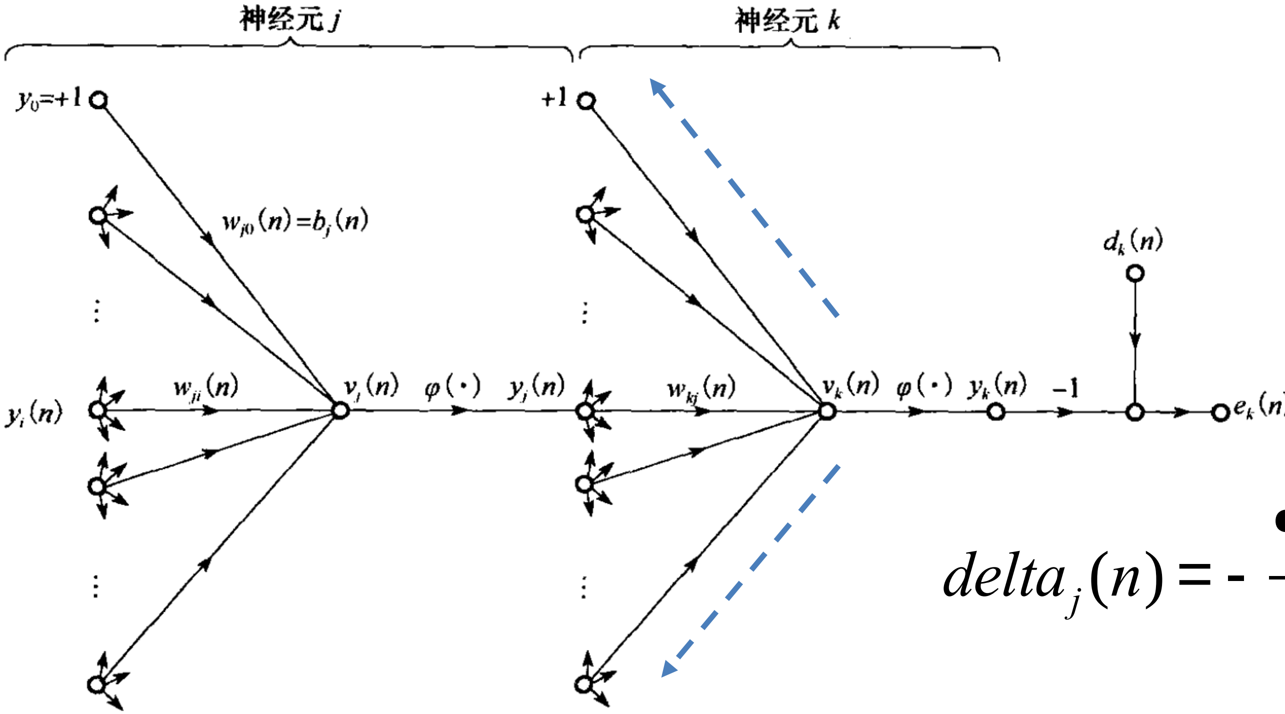
假设神经元k为输出层神经元

$$Error(n) = \frac{1}{2}\sum_k e_k^2(n)$$

注意为什么这样

则可求解

$$\frac{\partial Error(n)}{\partial y_j(n)} = \boxed{\sum_k e_k \frac{\partial e_k(n)}{\partial y_j(n)}} = \sum_k e_k \frac{\partial e_k(n)}{\partial v_k(n)} \frac{\partial v_k(n)}{\partial y_j(n)}$$



$$delta_j(n) = -\frac{\partial Error(n)}{\partial y_j(n)} \varphi_j'(v_j(n))$$

又因为

$$e_k(n) = d_k(n) - y_k(n) = d_k(n) - \varphi_k(v_k(n))$$

所以

$$\boxed{\frac{\partial Error(n)}{\partial y_j(n)} = -\sum_k e_k(n)\varphi_k'(v_k(n))w_{kj}(n)}$$

根据局域梯度的定义，可得

$$\boxed{\frac{\partial Error(n)}{\partial y_j(n)} = -\sum_k delta_k(n) w_{kj}(n)}$$

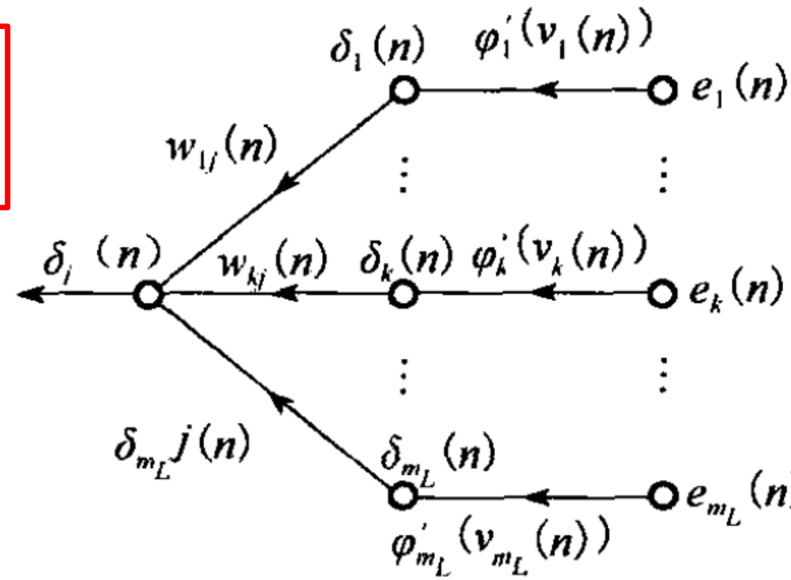
认真思考此公式的物理意义

这个公式是反向传播的“真谛”

因此

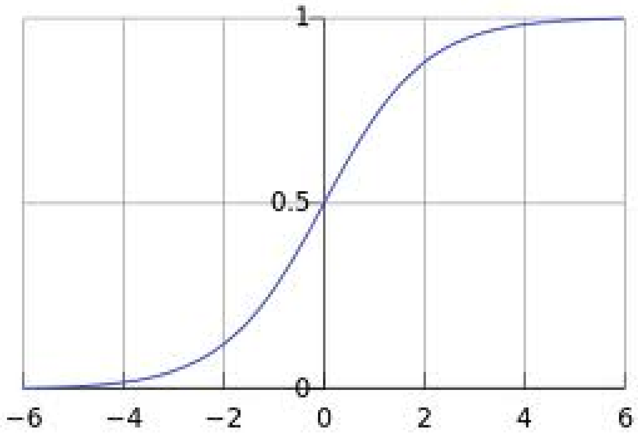
$$delta_j(n) = \varphi_j'(v_j(n)) \sum_k delta_k(n) w_{kj}(n)$$

$$\Delta w_{ji}(n) = \alpha * delta_j(n) * y_i(n)$$



- 反向传播的误差信号的转变——局域梯度delta：
- 第一项仅依赖于神经元激励函数
- 第二项为反向上一层的输入加权和，其中第一项需要误差e的知识，第二项体现了信用分配

sigmoid激活函数



- **特点**
  - ✓ λ是挤压参数，值越大，区间[0,1]上越接近直线。
  - ✓ 求导计算简化为加乘运算(但仍需要计算指数项)。

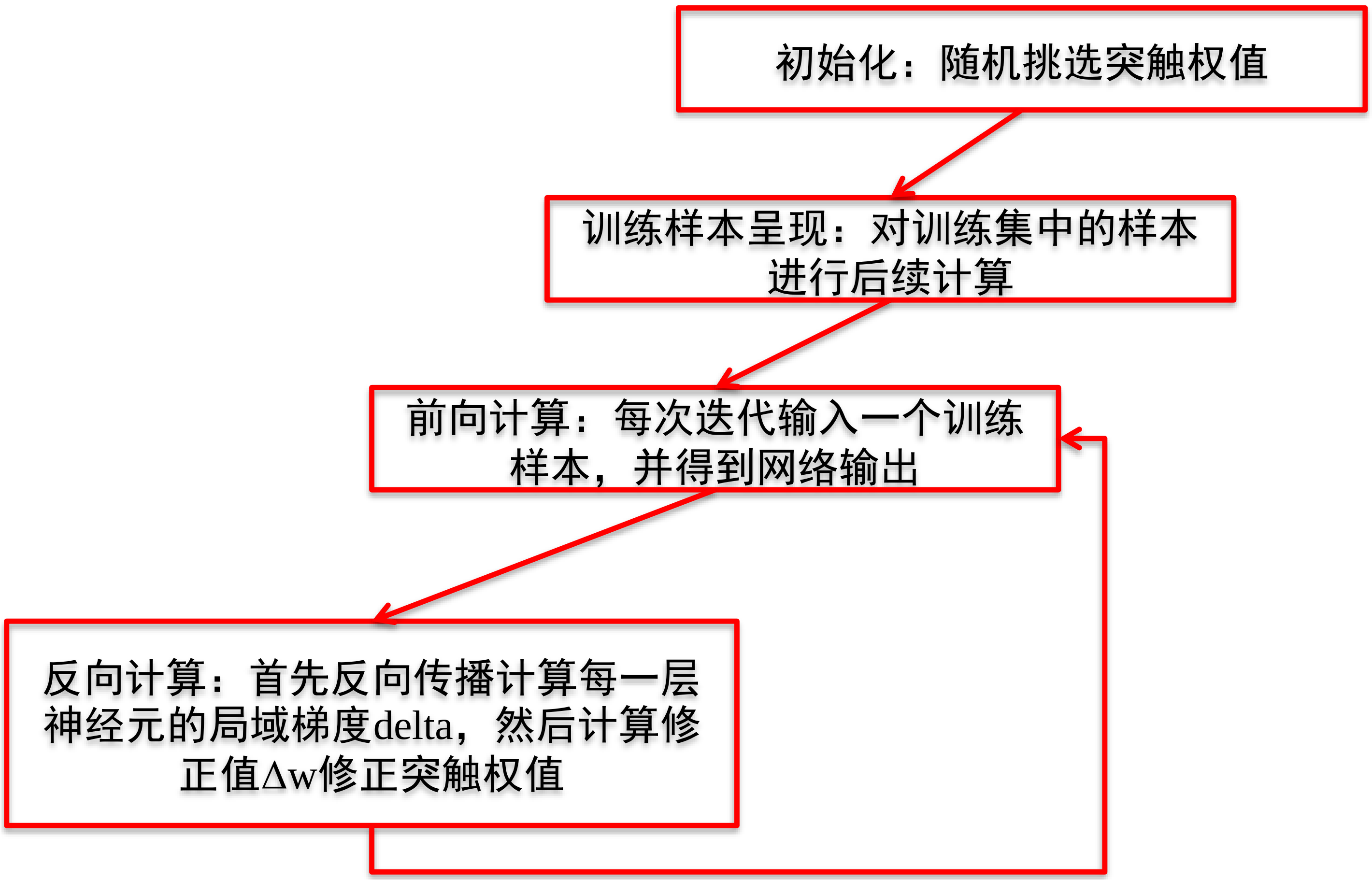
$$f(\mathrm{net}) = \frac{1}{1+e^{-\lambda * net}}$$

$$f'(net) = -\lambda e^{-\lambda}\left(1+e^{-\lambda * net}\right)^{-2}$$

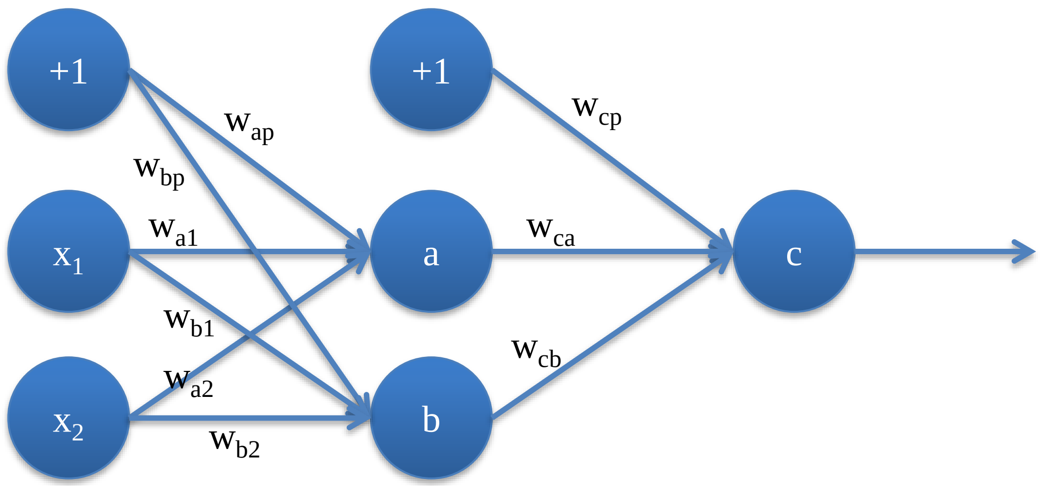
$$= -\lambda\left(1+e^{-\lambda * net}\right)^{-1}\left[1-\left(1+e^{-\lambda * net}\right)^{-1}\right]$$

$$= -\lambda f(net)\left(1-f(net)\right)$$

反向传播算法


初始化：随机挑选突触权值
训练样本呈现：对训练集中的样本进行后续计算
前向计算：每次迭代输入一个训练样本，并得到网络输出
反向计算：首先反向传播计算每一层神经元的局域梯度delta，然后计算修正值Δw修正突触权值

反向传播算法实例：异或



- 初始化：将所有的权值w初始化为0，并选择sigmoid(/logistic)函数为神经元的激励函数。
- 训练样本的呈现：训练样本为异或真值表—(0,0)→0; (0,1)→1; (1,0)→1; (1,1)→0, 并进行反复迭代。
- 后两步迭代过程：以第一个输入样例 (0,0)→0 为例。

大纲

多层感知机MLP

- 回顾
- 反向传播
- 其他议题

自动编码器AUTOENCODING

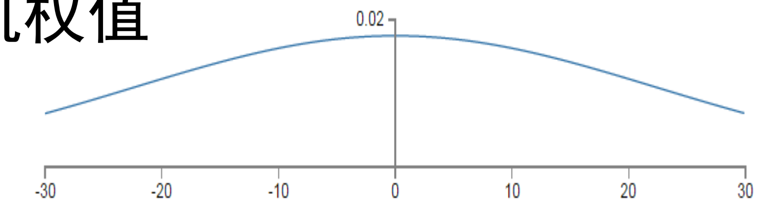
径向基网络RBF

其他议题

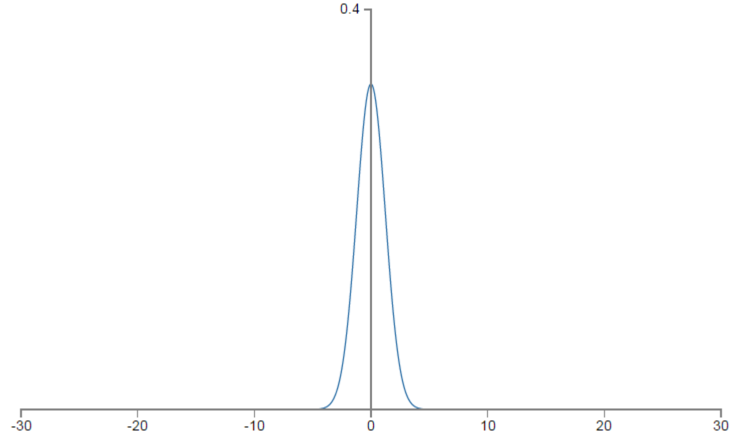
- 初始权值
- 激活函数选择
- 顺序和批量训练
- 局部极小和冲量
- 停止机制

初始权值

- 模型选择，需要多次设定初始随机权值



- 简易方法：权值 $w \sim (\mathbf{0}, 1)$
- 独立变量和的方差 = 独立变量方差的和，输出值$\sim(\mathbf{0}, n)$
- 导致输出值过大，进一步导致激活函数饱和，梯度趋近于0，学习失效
- 因此：权值 $w \sim (\mathbf{0}, {}^{1}/_{\sqrt{n}})$



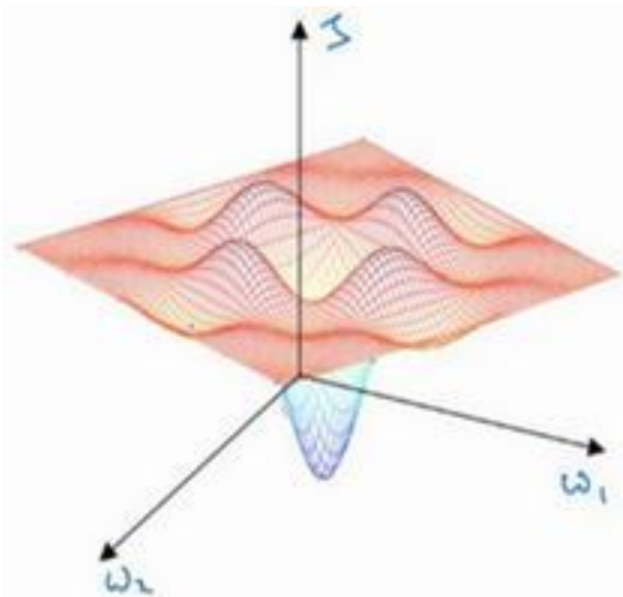
激活函数选择

- 分类问题：sigmoid函数
- 回归问题：输出节点的激活函数，$y_\kappa = g(h) = h$
- Soft-max激活函数 $y_\kappa = g(h_\kappa) = \frac{\exp(h_\kappa)}{\sum_{k=1}^{N} \exp(h_\kappa)}$
- 其他深度学习中用的非饱和激活函数

顺序和批量训练

- 批量训练(梯度下降 gradient descent)
  - ✓ 计算所有训练样本的误差和。缺点：计算代价大/收敛速度快/局部极小
- 顺序训练
  - ✓ 按次序计算每个训练样本的误差。不需要计算总误差，快/局部极小/噪声敏感
- 小批量训练(随机梯度下降 stochastic gradient descent)
  - ✓ Mini-Batch → SGD。适用于大规模数据。

局部极小和冲量



- 冲量 (此部分学习可结合第7讲)
  - ✓ 加大搜索步长的效果，能更快的进行收敛。
  - ✓ 越过某些狭窄的局部极小值，达到更小的地方

$$w_{\zeta\kappa}^{t} \leftarrow w_{\zeta\kappa}^{t-1} + \eta\delta_o(\kappa)a_{\zeta}^{hidden} + \alpha\Delta w_{\zeta\kappa}^{t-1}$$

梯度为0的点，并不是全局最优。
那么，对学习算法如何调整呢？

$$\Delta w_{\zeta\kappa}^{t} = \eta\delta_o(\kappa)a_{\zeta}^{hidden} + \alpha\Delta w_{\zeta\kappa}^{t-1}$$

停止机制

- 设定固定迭代步数
- 设定误差小于某个固定阈值
- 以上两者的结合

易导致过拟合

- 利用验证集观察误差的变化，找到合适的参数(模型选择)

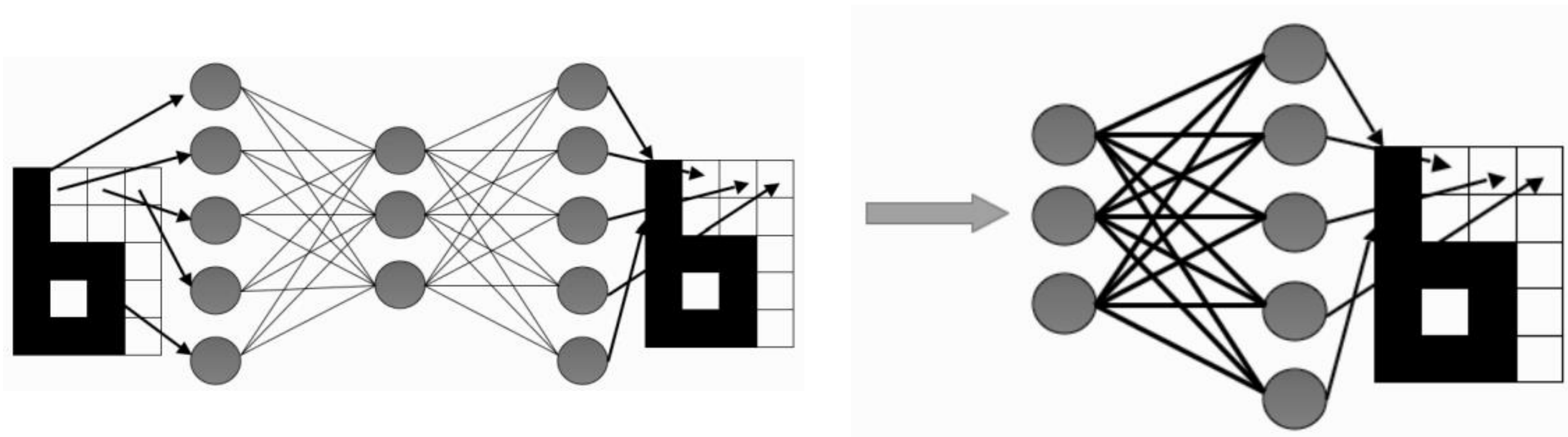
大纲

多层感知机MLP

自动编码器AUTOENCODER

径向基网络RBF

自动编码器

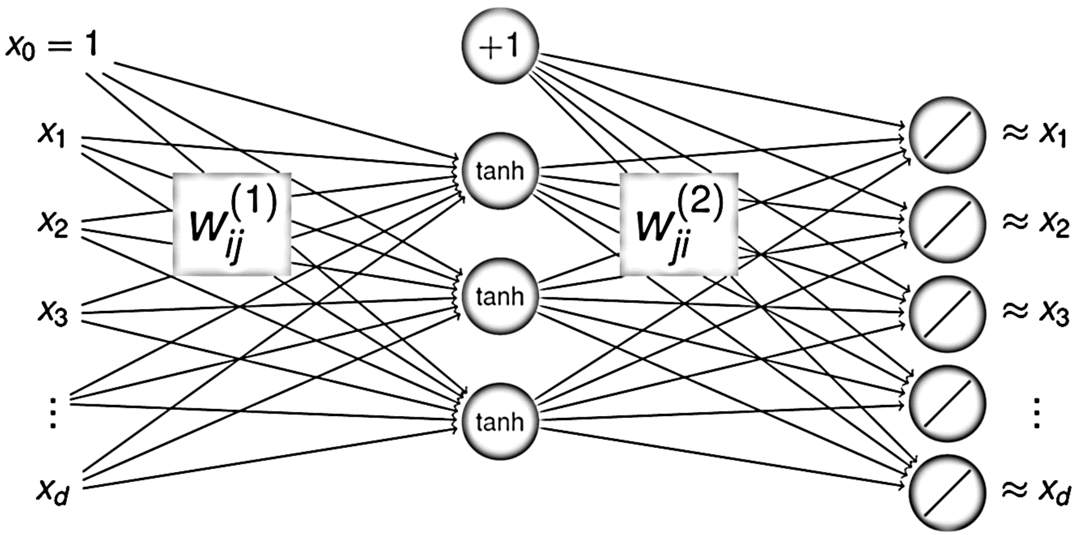


$$\phi : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{F}$$

$$\psi : \mathcal{F} \rightarrow \mathcal{X}$$

$$\phi, \psi = \underset{\phi,\psi}{\arg\min} \, \|X - (\psi \circ \phi) X\|^2$$

自动编码器



- ✓ W_{ij}作为W_{ji}的逆函数
- ✓ 中间层输出加上正则化项(例如稀疏约束)

$$\mathbf{z} = \sigma(\mathbf{W}\mathbf{x} + \mathbf{b})$$

$$\mathbf{x}' = \sigma'(\mathbf{W}'\mathbf{z} + \mathbf{b}')$$

$$\mathcal{L}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|^2 = \|\mathbf{x} - \sigma'(\mathbf{W}'(\sigma(\mathbf{W}\mathbf{x} + \mathbf{b})) + \mathbf{b}')\|^2$$

大纲

多层感知机MLP

自动编码器AUTOENCODING

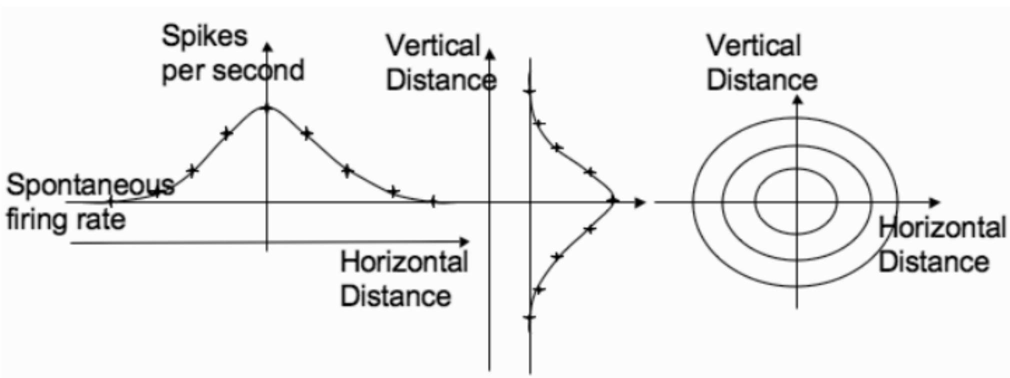
径向基网络RBF

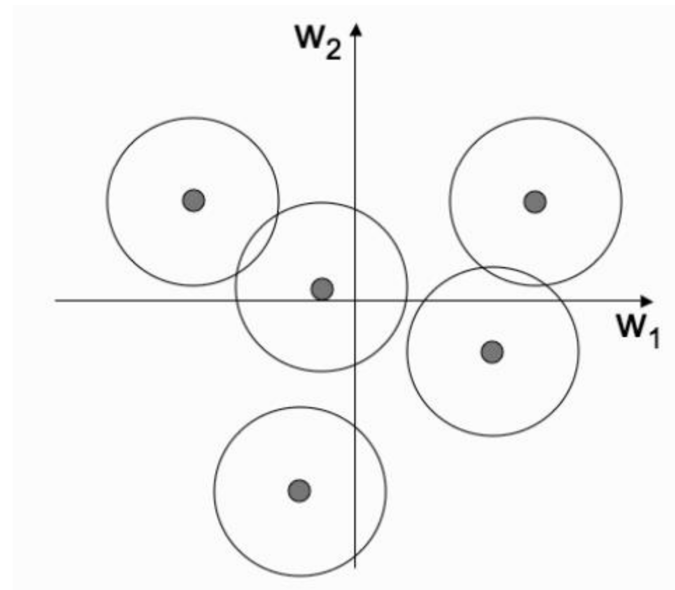
感受野 编辑 讨论 上传视频

感受野，感受器受刺激兴奋时，通过感受器官中的向心神经元;
应（支配）的刺激区域就叫做神经元的感受野（receptive field）。
感觉区的神经元都有各自的感受野。随感觉种类不同，感受野的性

在视觉通路上，视网膜上的光感受器（杆体细胞和锥体细胞）
胞，外膝状体细胞以及视觉皮层中的神经细胞。反过来，任何一种
依赖于视网膜上的许多光感受器。我们称直接或间接影响某一特定
(receptive field)。

感受野





$$g(\mathbf{x}, \mathbf{w}, \sigma) = \exp\left(\frac{-||\mathbf{x} - \mathbf{w}||^2}{2\sigma^2}\right)$$

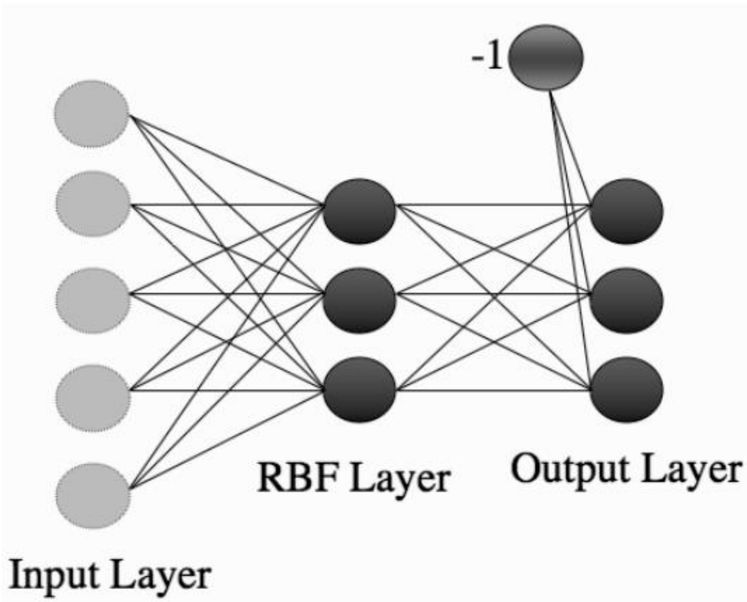
中心点：径向基位置；

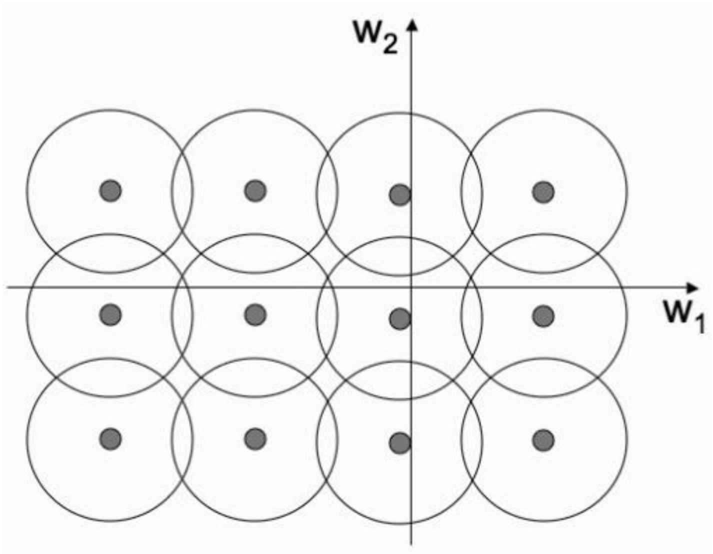
圆圈大小：感受野尺寸。

注意：径向基函数的选择有很多种，

例如最简单的欧式距离

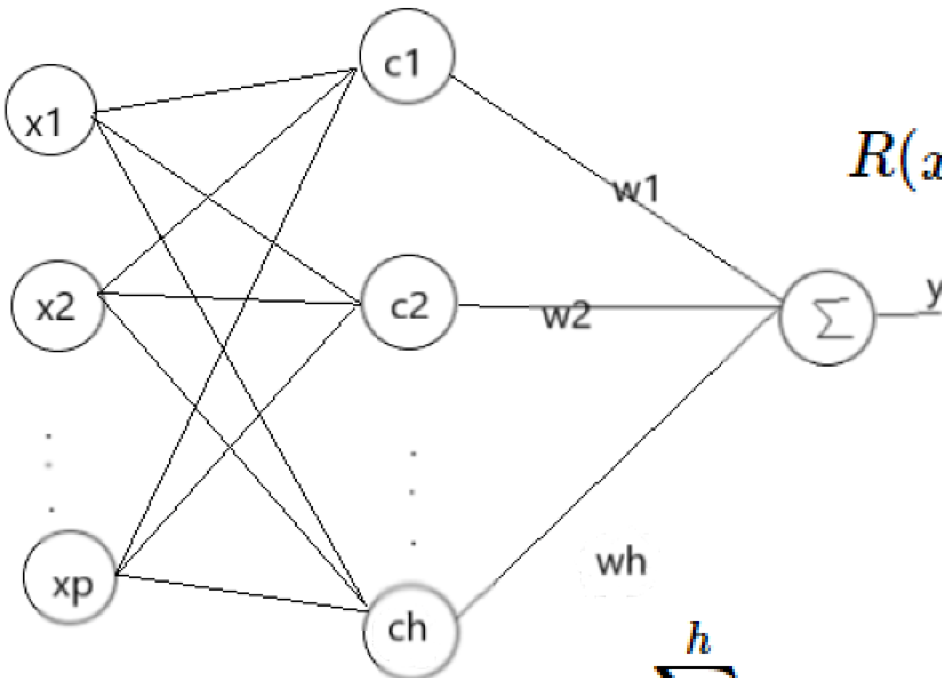
径向基网络





- RBF层激活规则：基于距离，局部匹配
- MLP激活规则：基于内积，全局匹配

径向基网络的学习



$$R(x_p - c_i) = exp(-\frac{1}{2\sigma^2}\|x_p - c_i\|^2)$$

$$\sigma_i = \frac{c_{max}}{\sqrt{2h}} \quad i = 1, 2, \cdots, h$$

$$y_j = \sum_{i=1}^{h} w_{ij} exp(-\frac{1}{2\sigma^2}\|x_p - c_i\|^2) \; j = 1, 2, \cdots, n$$

损失 $$ERROR = \sum_{j}^{n}\left(d_j - \phi_j(y_j)\right)$$

径向基网络的学习

求解的参数有3个：基函数的中心、方差以及隐含层到输出层的权值。

径向基函数算法

- 以任一种方式放置RBF的中心：
  - ✓ 用均值算法初始化RBF中心的位置 或
  - ✓ 用随机选择的数据点作为RBF的中心
- 用公式计算RBF节点的行为

$$g(\mathbf{x}, \mathbf{w}, \sigma) = \exp\left(\frac{-||\mathbf{x} - \mathbf{w}||^2}{2\sigma^2}\right)$$

- 用任一种方式训练输出的权值
  - ✓ 用感知机 或
  - ✓ 计算RBF中心活化的伪逆

$$\mathbf{G}^+ = (\mathbf{G}^{\mathrm{T}}\mathbf{G})^{-1}\mathbf{G}^{\mathrm{T}}$$

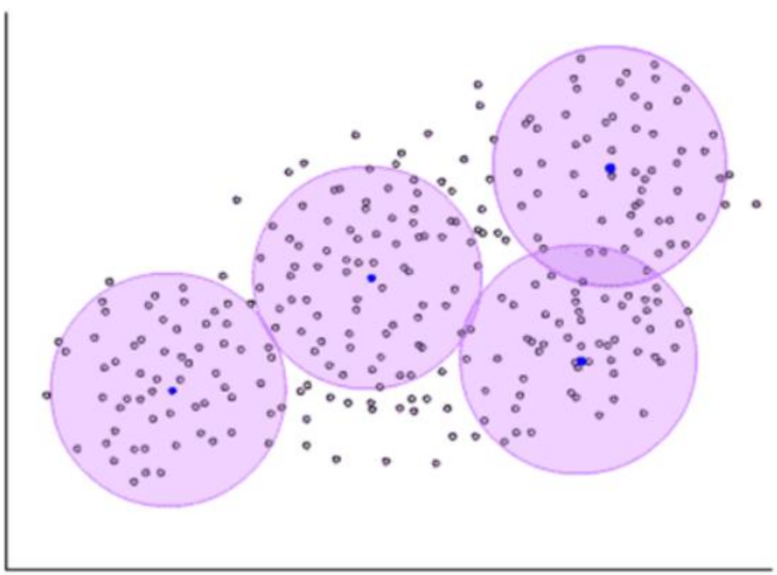
径向基网络的原理

- 用RBF作为隐单元的“基”构成隐含层空间，通过确定RBF的中心点，直接将输入矢量映射到隐空间，不需要通过权连接。
- 隐含层空间到输出空间的映射是线性的，网络的输出是隐单元输出的线性加权和，此处的权即为网络可调参数。
- **隐含层的作用是把向量从低维度的p映射到高维度的h，这样低维度线性不可分的情况到高维度就可以变得线性可分，主要就是核函数的思想。**
- 优点
  - ✓ 网络由输入到输出的映射是非线性的，而网络输出对可调参数而言却又是线性的。
  - ✓ 网络的权就可由线性方程组直接解出，从而大大加快学习速度并避免局部极小问题。

径向基网络 vs 多层感知机

◘ 局部逼近与全局逼近

- ✓ BP神经网络是对非线性映射的**全局逼近**。
- ✓ RBF神经网络具有**“局部映射”**特性。



所谓局部逼近是指目标函数的逼近仅仅根据查询点附近的数据。

径向基网络 vs 多层感知机

- 中间层数的区别
  - ✓ BP神经网络可以有多个隐含层，但是RBF只有一个隐含层。
- 训练速度的区别
  - ✓ 使用RBF的训练速度快，一方面是因为隐含层较少，另一方面，局部逼近可以简化计算量。对于一个输入x，只有部分神经元会有响应，其他的都近似为0，对应的w就不用调参了。
- 最优性
  - ✓ Poggio和Girosi证明：RBF网络是连续函数的最佳逼近，而BP网络不是。

径向基网络 vs SVM

SVM中的高斯核函数可以看作与每一个输入点的距离，不太适应于大样本和大的特征数的情况

RBF神经网络对输入点做了一个聚类。RBF神经网络用高斯核函数时,其数据中心C可以是训练样本中的抽样，此时与SVM的高斯核函数是完全等价的。

RBF神经网络

$$G(X,X^p)=exp(-\frac{1}{2\sigma^2}||X-X^p||^2)$$

SVM

$$\kappa(x_1,x_2)=\exp\left(-\frac{\|x_1-x_2\|^2}{2\sigma^2}\right)$$

思考和讨论

1. BP学习算法中的隐藏参数学习？
2. 局部梯度域。
3. 自动编码器的结构和学习。
4. RBF与MLP的区别和联系。

必做实验一：神经网络

- 任务描述：用python语言，实现神经网络学习，完成“手写体识别”任务。建议：使用图像预处理技术（去噪，归一化，分割等），再使用CNN进行特征提取。
- 数据集：Mnist数据集（60000个训练样本和10000个测试样本组成，每个样本都是一张 28 * 28 像素的灰度手写数字图片），数据集下载：http://yann.lecun.com/exdb/mnist/ （一共4个文件，训练集、训练集标签、测试集、测试集标签）
- 提交检查内容(包括但不限于)：
  - ✓ 代码，关键代码需要注释；
  - ✓ PDF文档，文档中要有明确的过程说明、样例截图等。
- 评分标准：判断标准主要采用准确率，即精度。在精度指标以外可扩展其他指标，作为加分项。
- 作业提交：3月24日前至 (文件名：学号-姓名-神经网络)

谢 谢 ！