工 业 和 信 息 化 部 “十 二 五” 规 划 教 材
“十 二 五” 国 家 重 点 图 书 出 版 规 划 项 目

模式识别

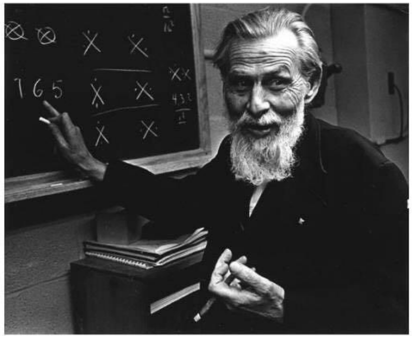
Pattern Recognition

第6讲 神经网络 I

哈尔滨工业大学 计算机学院
模式识别与智能系统研究中心
ISBN 978-7-5603-4763-9

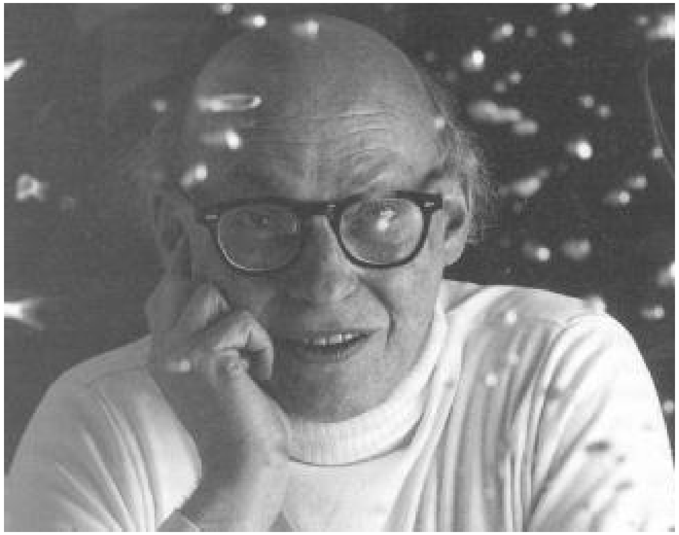
ANN history（1）

- 萌芽期（--1949年）
  - 1943年M-P模型：阈值加权和模型
    - 精神病学家、生理学家 McCulloch
    - 数学家 Pitts
      - M-P模型、神经网络逻辑演算
      - ANN原则上可以计算任何可计算函数
      - 标志着 ANN & AI 的诞生
  - 1949年Hebb学习规则
    - 自学习



哈尔滨工业大学 计算机学院
模式识别与智能系统研究中心
ISBN 978-7-5603-4763-9

- 第一次高潮（1950-68年）
  - 1954：Minsky与Princeton大学“神经网络”博士论文
    - 1967：《Computation: Finite and Infinite Machine》
      - 第一本以书的形式扩展了 M-P 的结果
  - 1958：F. Rosenblatt
    - 单层感知器及其电路模拟
    - 感知器收敛定理
    - 学习定理
      - ANN可以学会它可以表达的任何东西
  - Widrow提出了自适应线性元件Adaline
    - 成功用于雷达天线等连续可调过程的控制



- 反思期（1969-1981年）
  - Marvin Minsky & S. Papert
  - 《Perceptron》, MIT, 1969
    - 著名人工智能学家、ANN专家
    - 造成了人工智能跌宕起伏的发展历程
    - 促成了三种不同的认知观的均衡发展和相互融合

2000多人 • 寥寥无几

- 线性不可分问题
  - XOR问题

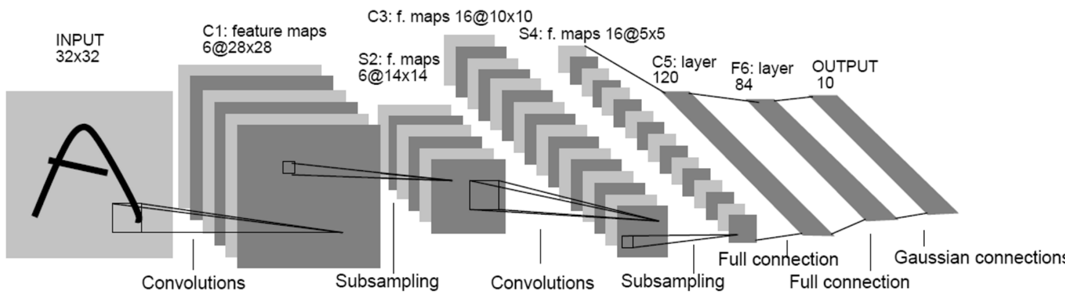
ISBN 978-7-5603-4763-9

- 第二次高潮（1982-89年）
  - 1982年 Hopfield网
    - 美国加州理工学院生物物理学家J. Hopfield
    - 将Lyapunov函数、动力学观点引入到神经网络中来
    - Hopfield网络的电路实现，使实用化成为可能
  - 1982年 Kohonen网
  - 1985年 Boltzmann机
  - 1986年 BP算法
    - Rumelhart(86)， Paker(82)， Werbos(74)，...
  - 1987年美国加州第一届神经网络国际会议
    - 1000多学者参加
  - 国内首届神经网络大会1990年，北京

ISBN 978-7-5603-4763-9

第三次高潮 2006-今天

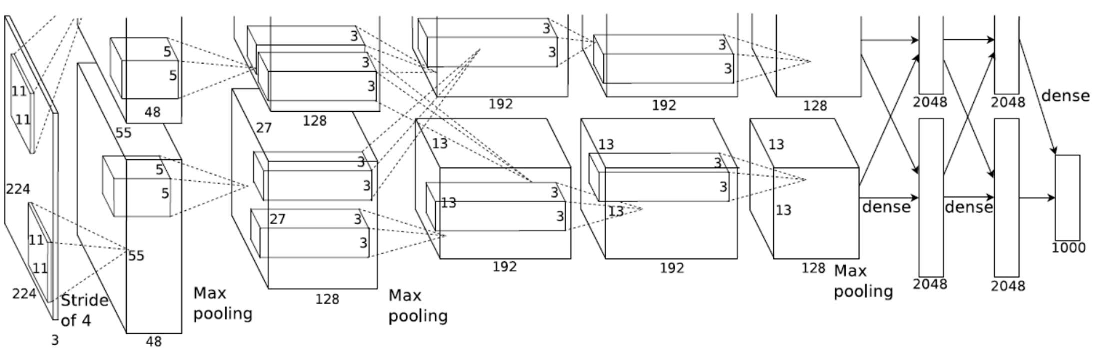
1989年Yann LeCun提出小型CNN 字符识别，

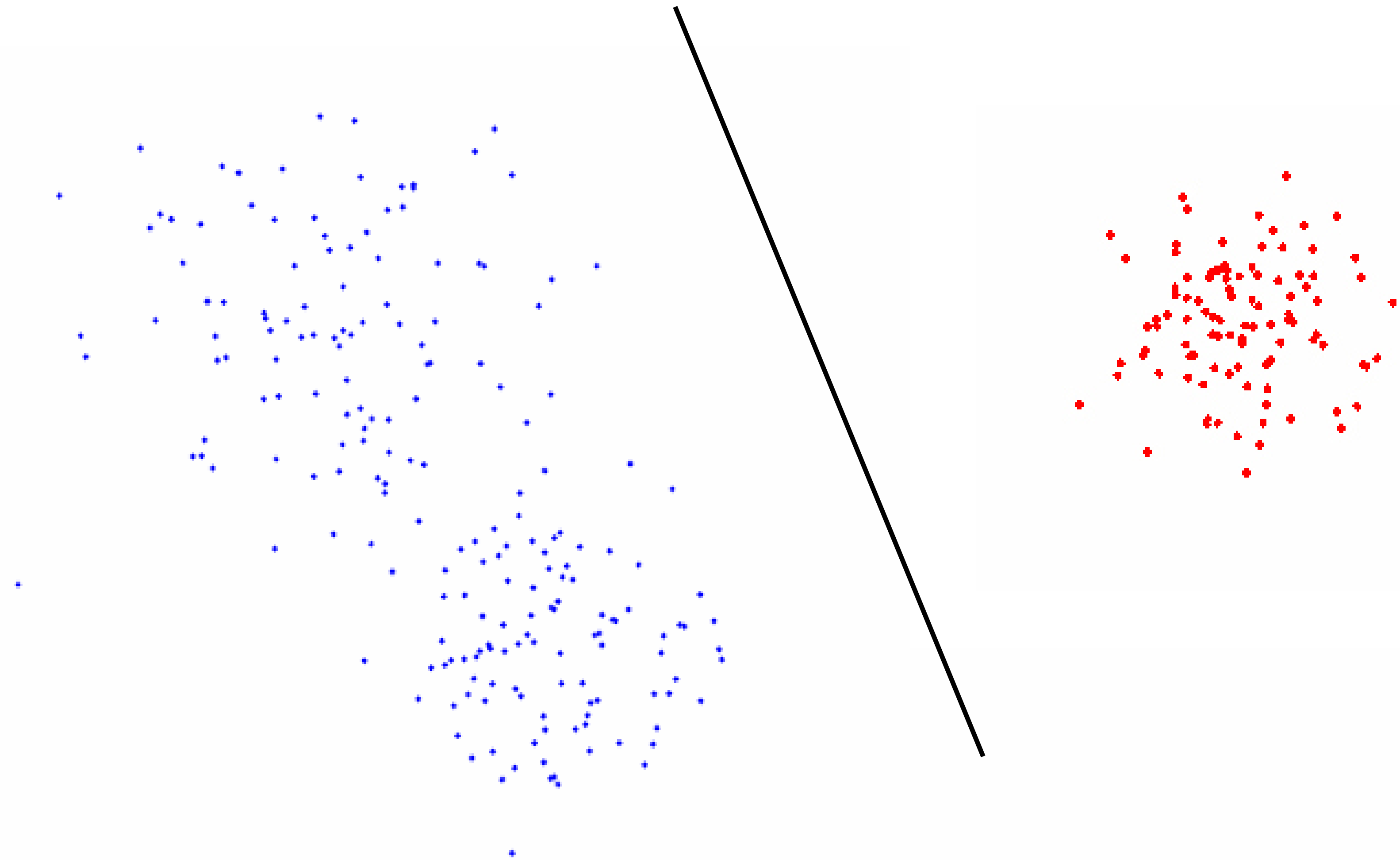


2006年Geoffery Hinton提出了深度学习（多层神经网络）

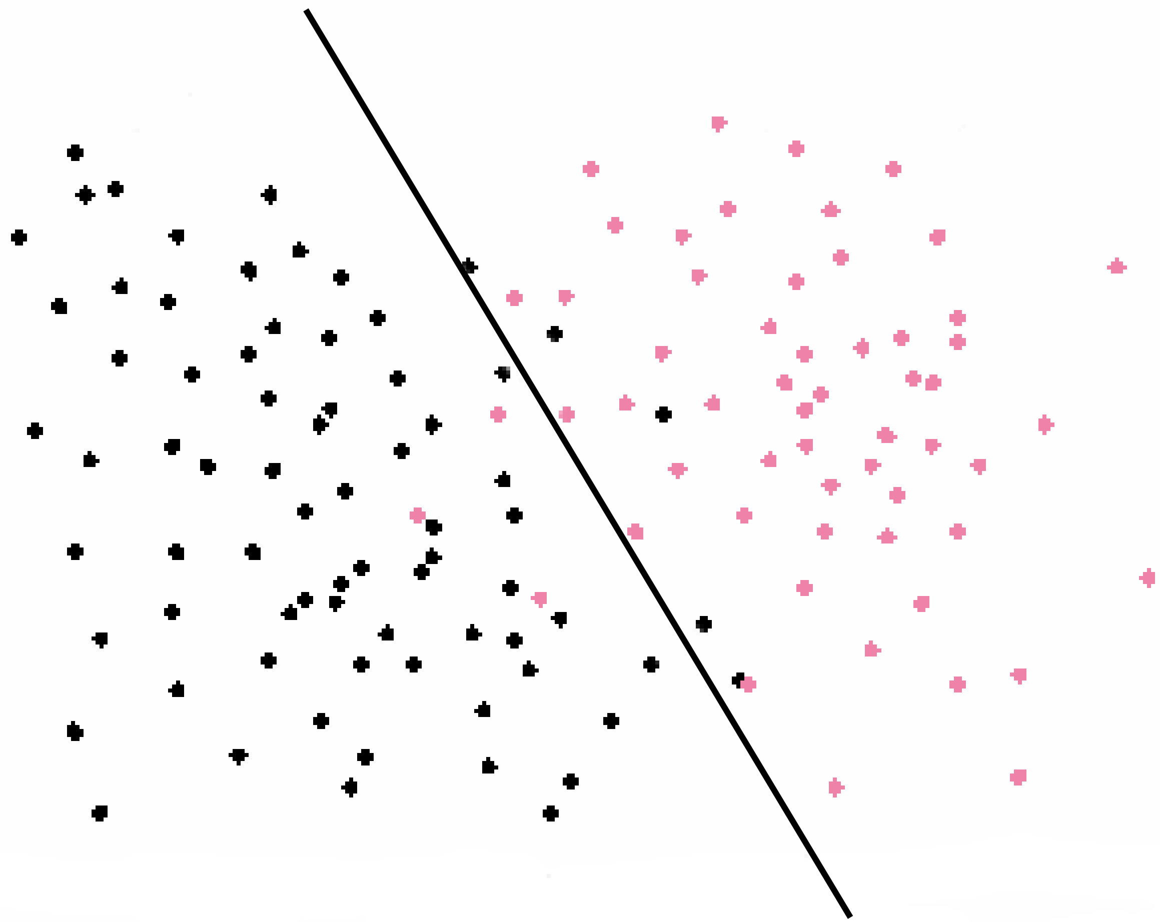
2012年10月，Geoffrey Hinton和他的两个学生在著名的

ImageNet问题上用更深的CNN





ISBN 978-7-5603-4763-9



ISBN 978-7-5603-4763-9

1线性判别函数和线性分类界面

线性判别函数

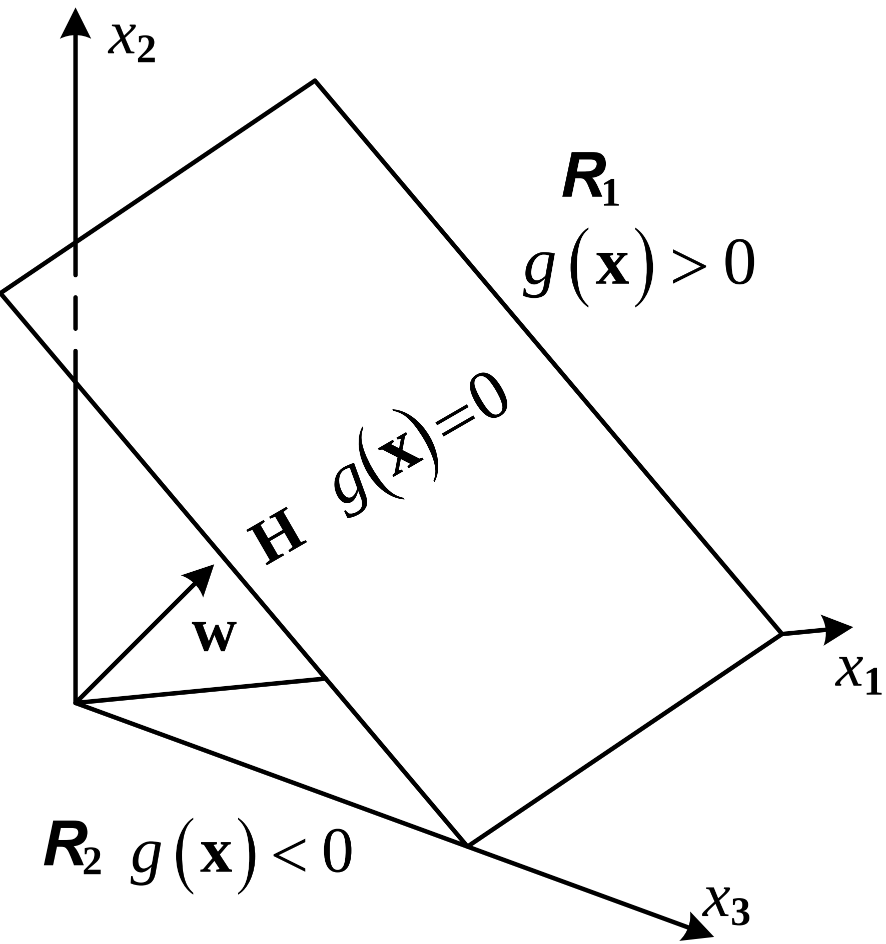
	3维空间平面	d维空间超平面
代数形式	$w_1x_1 + w_2x_2 + w_3x_3 + w_0 = 0$	$w_1x_1 + w_2x_2 + \cdots + w_dx_d + w_0 = 0$
向量形式	$(w_1, w_2, w_3)\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} + w_0 = 0$	$(w_1, w_2, \cdots, w_d)\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_d \end{pmatrix} + w_0 = 0$
	$\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x} + w_0 = 0$	其中 $\mathbf{W}$:权值矢量 w_0 :偏置

d维特征空间中的超平面方程 $H : g(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x} + w_0 = 0$

- 特征矢量：**x**=(x1, x2,…, xd)$^{\mathrm{T}}$
- 权矢量**w**=(w1, w2, …, wd)$^{\mathrm{T}}$:
- **偏置(bias)：w0**

1线性判别函数和线性分类界面

线性判别函数



- H将特征空间划分为两区域R1,R2

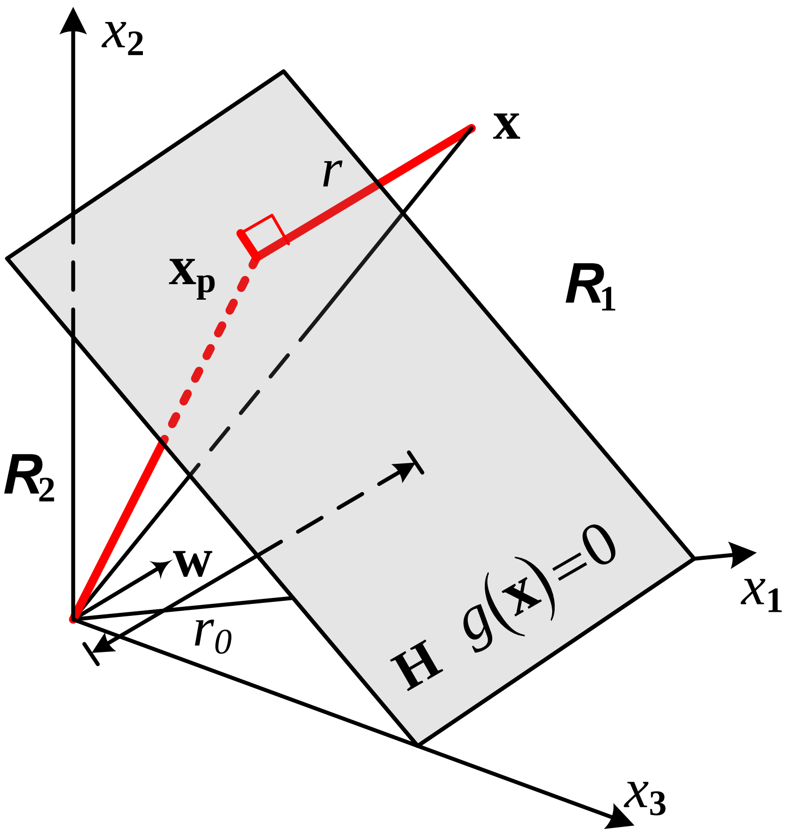
$$g(\mathbf{x})\begin{cases}>0, & \mathbf{x}\text{处于H上方R2区域}\\ =0, & \mathbf{x}\text{在H上}\\ <0, & \mathbf{x}\text{处于H下方R2区域}\end{cases}$$

- 权矢量**w**垂直于分类面H，指向R1区域

ISBN 978-7-5603-4763-9

1线性判别函数和线性分类界面

线性判别函数——断言



➢点到平面的距离

平面H方程：$g(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x} + w_0 = 0$

点到平面H距离：$r = \dfrac{g(\mathbf{x})}{\|\mathbf{w}\|}$

原点到平面距离：

$$r_0 = \frac{g(\mathbf{0})}{\|\mathbf{w}\|} = \frac{\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{0} + w_0}{\|\mathbf{w}\|} = \frac{w_0}{\|\mathbf{w}\|}$$

ISBN 978-7-5603-4763-9

1线性判别函数和线性分类界面

两类问题线性判别准则

$$g(\mathbf{x})=\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}+w_0\begin{cases}>0, & \mathbf{x}\in\omega_1\\<0, & \mathbf{x}\in\omega_2\\=0, & \text{拒识}\end{cases}$$

已知一组训练样本，如何计算出合适的$\mathbf{w}$，w_0?
——分类器的学习

1. 线性分类界面H是d维空间中的一个超平面；
2. 分类界面将d维空间分成两部分，R_1，R_2分别属于两个类别；
3. 判别函数的权矢量w是一个垂直于分类界面H的矢量，其方向指向区域R_1；
4. 偏置w_0与原点到分类界面H的距离有关：$r_0=\frac{w_0}{\|\mathbf{w}\|}$

ISBN 978-7-5603-4763-9

2感知器算法

线性判别函数分类器的学习

- 现有属于两个类别的训练样本集 $\boldsymbol{D}=\{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_{2,\ldots,} \mathbf{x}_{1n}\}$ 分别标记为$\omega_{1,}\omega_2$用这些样本来确定一个判别函数$g(\mathbf{x})=\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}+w_0$ 的权矢量$\mathbf{w}$及偏置w_0。
- 在线性可分的情况下，希望得到的判别函数能够将所有的训练样本正确分类：

$$\begin{cases} \mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}+w_0>0, & \forall \mathbf{x}\in\omega_1 \\ \mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}+w_0<0, & \forall \mathbf{x}\in\omega_2 \end{cases}$$

- 线性不可分的情况下，判别函数产生错误的概率最小。

ISBN 978-7-5603-4763-9

2感知器算法

	线性判别函数	线性判别函数的增广形式
函数形式	$g(\mathbf{x})=(w_1,w_2,\cdots,w_d)\begin{pmatrix}x_1\\x_2\\\vdots\\x_d\end{pmatrix}+w_0$	$g(\mathbf{x})=(w_0,w_1,w_2,\cdots,w_d)\begin{pmatrix}1\\x_1\\x_2\\\vdots\\x_d\end{pmatrix}$
	$g(\mathbf{x})=\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}+w_0$	增广权矢量：$\mathbf{a}=\left[\mathbf{w}^{\mathrm{T}},w_0\right]^{\mathrm{T}}$ $g(\mathbf{y})=\mathbf{a}^{\mathrm{T}}\mathbf{y}_0$
判别规则	$g(\mathbf{x})=\begin{cases}>0, & \mathbf{x}\in\omega_1\\<0, & \mathbf{x}\in\omega_2\\=0, & \text{拒识}\end{cases}$	样本规范化：$\begin{cases}\mathbf{y}=\left[\mathbf{x}^{\mathrm{T}},1\right]^{\mathrm{T}}, & \forall\mathbf{x}\in\omega_1\\\mathbf{y}=\left[-\mathbf{x}^{\mathrm{T}},-1\right]^{\mathrm{T}}, & \forall\mathbf{x}\in\omega_2\end{cases}$ 统一形式：$\mathbf{a}^{\mathrm{T}}\mathbf{y}_i>0,\quad i=1,\cdots,n$

线性判别函数的增广形式

$$g(\mathbf{y})=\mathbf{a}^{\mathrm{T}}\mathbf{y}$$

- $\mathbf{y}=(1, x_1, x_2,\ldots, x_d)^{\mathrm{T}}$: 增广的特征矢量;
- $\mathbf{a}=(w_0, w_1, w_2, \ldots, w_d)^{\mathrm{T}}$: 增广的权矢量;
- 在线性可分的情况下，希望得到的判别函数能够将所有的训练样本$\mathbf{y}_i$正确分类:

$$\mathbf{a}^{\mathrm{T}}\mathbf{y}_i>0,\quad i=1,\cdots,n$$

不等式组的求解?

ISBN 978-7-5603-4763-9

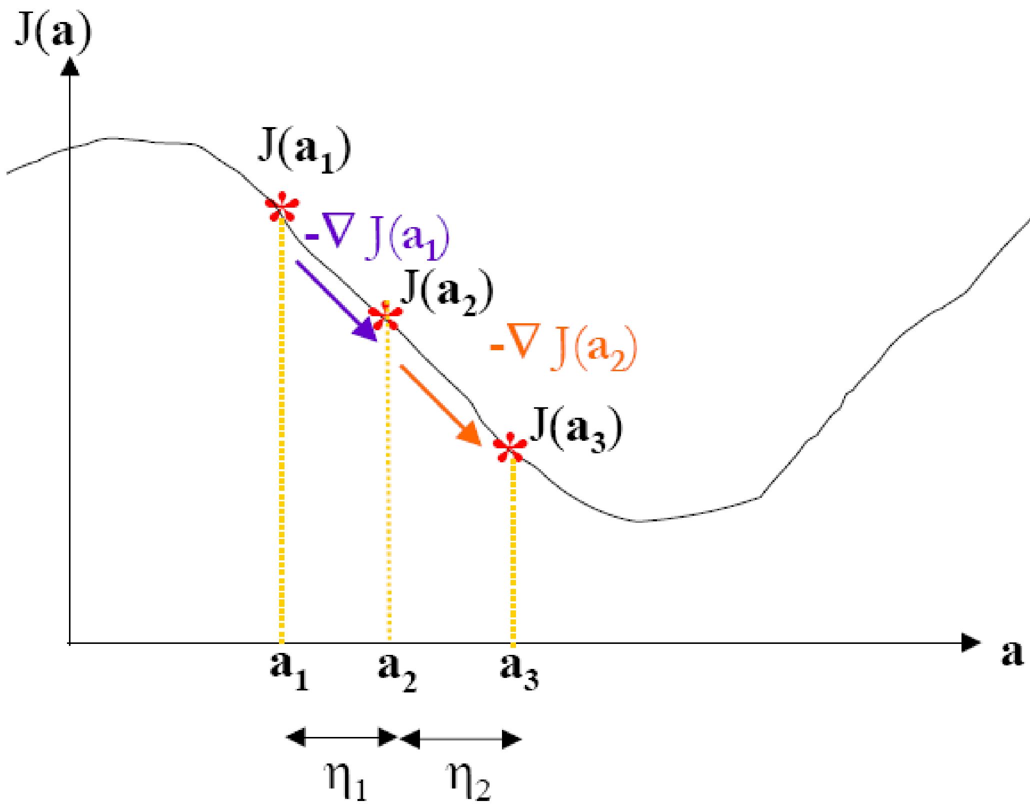
不等式组求解方法—梯度下降法

- 求解不等式组采用的最优化的方法：
  - 定义一个准则函数J(a)，当a是解向量时，J(a)为最小；
  - 采用最优化方法求解标量函数J(a)的极小值。
- 最优化方法采用最多的是梯度下降法，
  - 设定初始权值矢量a(1)，然后沿梯度的负方向迭代计算：

$$\mathbf{a}(k+1)=\mathbf{a}(k)-\eta(k)\nabla J\left(\mathbf{a}(k)\right)$$

其中$\eta(k)$称为学习率，或称步长。

不等式组求解方法—梯度下降法



Initialize **a**, θ, η(k), k=0;

do k←k+1

a ← **a**- η(k) .∇J(**a**)

until |η(k) .∇J(**a**)|< θ

return **a**

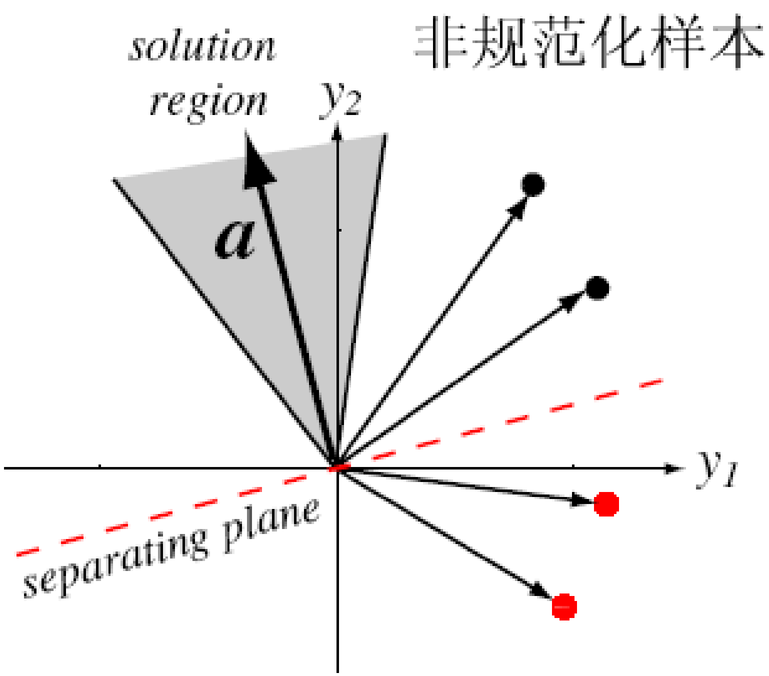
end

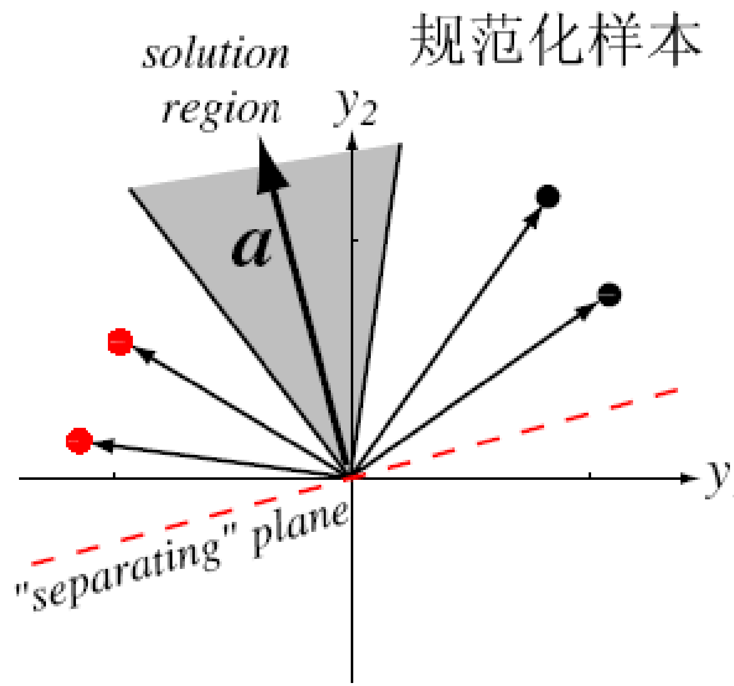
$$\mathbf{a}(k+1)=\mathbf{a}(k)-\eta(k)\nabla J(\mathbf{a}(k))$$

ISBN 978-7-5603-4763-9

解区域的几何解释(特征空间中）

- 特征空间中：矢量a是垂直于分类界面的矢量：

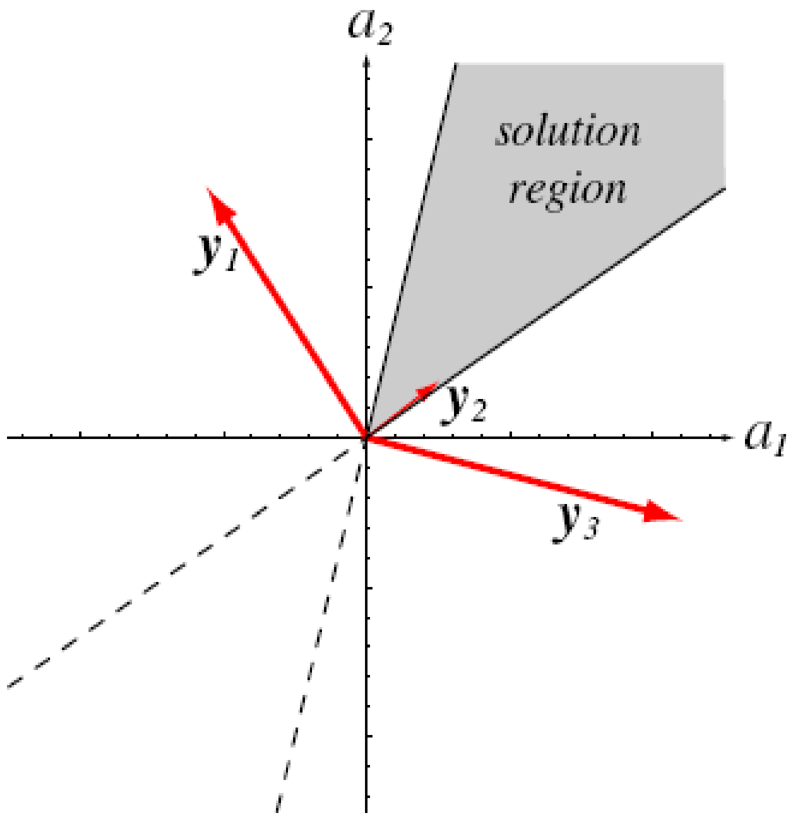




ISBN 978-7-5603-4763-9

解区域的几何解释(权空间中)

权空间中：$\mathbf{a}^T\mathbf{y}_i=0$是一个通过原点的超平面，$\mathbf{y}_i$是法向量，$\mathbf{a}$是空间中一个点。

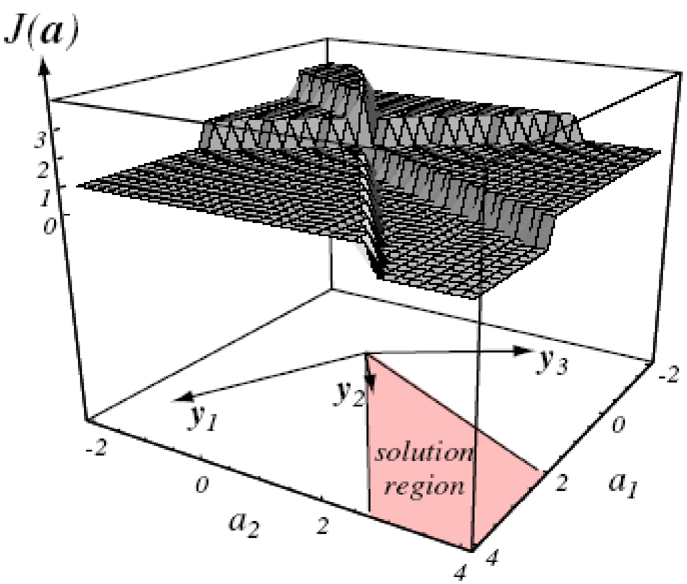


2感知器算法

- 最少错分样本数准则：

$$J_N(\mathbf{a}) = \sum_{\mathbf{y}\in Y} 1$$

不连续、梯度为0
无法进行迭代优化！

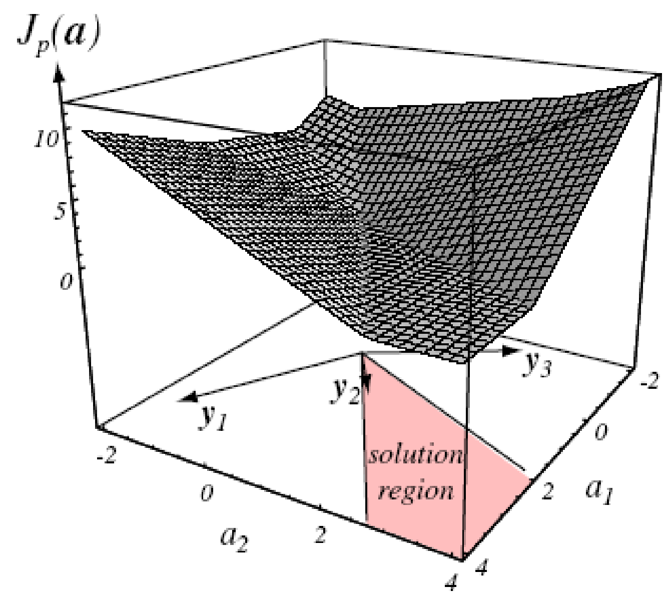


- 感知器准则：错分样本到分类界面“距离”之和

$$J_P(\mathbf{a}) = \sum_{\mathbf{y}\in Y} \left(-\mathbf{a}^{\mathrm{T}}\mathbf{y}\right)$$

$$\nabla J_P = \sum_{\mathbf{y}\in \mathcal{Y}} (-\mathbf{y})$$

连续、
梯度不为0
可迭代优化！



ISBN 978-7-5603-4763-9

感知器算法(批量调整版本)

1. begin initialize $\mathbf{a}(0)$, $\eta(\cdot)$,θ, k←0
2. do k←k+1
3. $$\mathbf{a}(k+1) \leftarrow \mathbf{a}(k) + \eta(k) \sum_{\mathbf{y} \in \mathcal{Y}_k} \mathbf{y}$$
4. until $\left| \eta(k) \sum_{\mathbf{y} \in \mathcal{Y}_k} \mathbf{y} \right| < \theta$
5. return a
6. end

感知器算法(单样本调整版本)

1. begin initialize $\mathbf{a}(0)$, k←0
2. do k←(k+1)mod n
3. if y_k is misclassified by a then

$$\mathbf{a}(k+1) \leftarrow \mathbf{a}(k) + \mathbf{y}_k$$

4. until all patterns properly classified
5. return a
6. end

作业：

- 有两类模式的训练样本：

  ω_1： { (0,0), (0,1) }

  ω_2： { (1,0), (1,1) }

- 用感知器算法求取判别函数，将两类样本分开，
- 初始权矢量为$\mathbf{a}(0)=(-2,0,-1)^{\mathrm{T}}$，第3维为偏置，
- 学习率 $\eta=1$

ISBN 978-7-5603-4763-9

- 五十年代Rosenblatt提出的一种自学习判别函数生成方法，
- 企图将其用于脑模型感知器，因此被称为感知准则函数。
- 随意确定的判别函数初始值，在对样本分类训练过程中逐步修正直至最终确定。

ISBN 978-7-5603-4763-9

感知器算法收敛证明

- 如果训练样本线性可分，固定增量算法给出的权向量序列必定终止于某个解向量
  - 每次校正，都使权向量更靠近解区域
  - 如果 $\hat{\mathbf{a}}$ 是解向量，随着训练样本的增加有：

$$\left\|\mathbf{a}(k+1)-\hat{\mathbf{a}}\right\|<\left\|\mathbf{a}(k)-\hat{\mathbf{a}}\right\|$$

ISBN 978-7-5603-4763-9

感知器算法收敛定理

设 $\hat{\mathbf{a}}$ 是解向量则 $\hat{\mathbf{a}}^{\mathrm{T}}\mathbf{y}_i > 0$，令$\alpha$为一比例因子，有：

$$\|\mathbf{a}(k+1)-\alpha\hat{\mathbf{a}}\|^2 = \|\mathbf{a}(k)+\mathbf{y}_k-\alpha\hat{\mathbf{a}}\|^2$$

$$= \|\mathbf{a}(k)-\alpha\hat{\mathbf{a}}\|^2 + 2\left(\underbrace{\mathbf{a}(k)^{\mathrm{T}}\mathbf{y}_k}_{<0} - \alpha\hat{\mathbf{a}}^{\mathrm{T}}\mathbf{y}_k\right) + \|\mathbf{y}_k\|^2$$

$\mathbf{y}_k$为错分样本

$$\le \|\mathbf{a}(k)-\alpha\hat{\mathbf{a}}\|^2 - 2\alpha\underbrace{\hat{\mathbf{a}}^{\mathrm{T}}\mathbf{y}_k}_{>0} + \|\mathbf{y}_k\|^2$$

$$\beta^2 = \max_i \|\mathbf{y}_i\|$$

$$\gamma = \min_i \left[\hat{\mathbf{a}}^{\mathrm{T}}\mathbf{y}_i\right] > 0$$

$$\le \|\mathbf{a}(k)-\alpha\hat{\mathbf{a}}\|^2 - 2\alpha\gamma + \beta^2$$

设 $\alpha=\beta^2/\gamma$

$$\le \|\mathbf{a}(k)-\alpha\hat{\mathbf{a}}\|^2 - \beta^2$$

每次校正后，从 $\mathbf{a}(k+1)$ 到 $\alpha\hat{\mathbf{a}}$ 的平方距离减少了β^2

ISBN 978-7-5603-4763-9

感知器算法收敛定理

每次校正后，从 $\mathbf{a}(k+1)$到 $\alpha\hat{\mathbf{a}}$ 的平方距离减少了β^2

$$\|\mathbf{a}(k+1)-\alpha\hat{\mathbf{a}}\|^2 \le \|\mathbf{a}(k)-\hat{\mathbf{a}}\|^2-\beta^2$$

经过k步校正后

$$\|\mathbf{a}(k+1)-\alpha\hat{\mathbf{a}}\|^2 \le \|\mathbf{a}(1)-\hat{\mathbf{a}}\|^2-k\beta^2$$

$$\alpha=\beta^2/\gamma$$

$$\beta^2=\max_i\|\mathbf{y}_i\|$$

$$\gamma=\min_i\left[\hat{\mathbf{a}}^t\mathbf{y}_i\right]>0$$

经过不超过k_0步校正后，校正终止

$$k_0=\|\mathbf{a}(1)-\alpha\hat{\mathbf{a}}\|^2/\beta^2 \quad if: \mathbf{a}(1)=0$$

$$=\|\alpha\hat{\mathbf{a}}\|^2/\beta^2=\alpha^2\|\hat{\mathbf{a}}\|^2/\beta^2=\frac{\|\hat{\mathbf{a}}\|^2\max_i\|\mathbf{y}_i\|}{\min_i\left[\hat{\mathbf{a}}^t\mathbf{y}_i\right]}$$

与解向量最接近正交的样本

（收敛的难点）

ISBN 978-7-5603-4763-9

感知器算法的特点

□学习率的选择

当样本线性可分情况下，学习率 $\eta(\cdot)$ 合适时，算法具有收敛性；

□收敛速度

$$k_0 = \frac{\|\hat{\mathbf{a}}\|^2 \max_i \|\mathbf{y}_i\|}{\min_i \left[\hat{\mathbf{a}}^t \mathbf{y}_i\right]}$$

□线性不可分的训练样本集

当样本线性不可分情况下，算法不收敛，且无法判断样本是否线性可分。

ISBN 978-7-5603-4763-9

感知器算法推广

错误分类点数：$$J_{mis}(\mathbf{a})=\sum_{\mathbf{y}\in Y}(1)$$

不连续

感知器判据：$$J_p(\mathbf{a})=\sum_{\mathbf{y}\in Y}-\mathbf{a}^{\mathrm{T}}\mathbf{y}$$

梯度不连续

平方误差判据：$$J_q(\mathbf{a})=\sum_{\mathbf{y}\in Y}(\mathbf{a}^{\mathrm{T}}\mathbf{y})^2$$

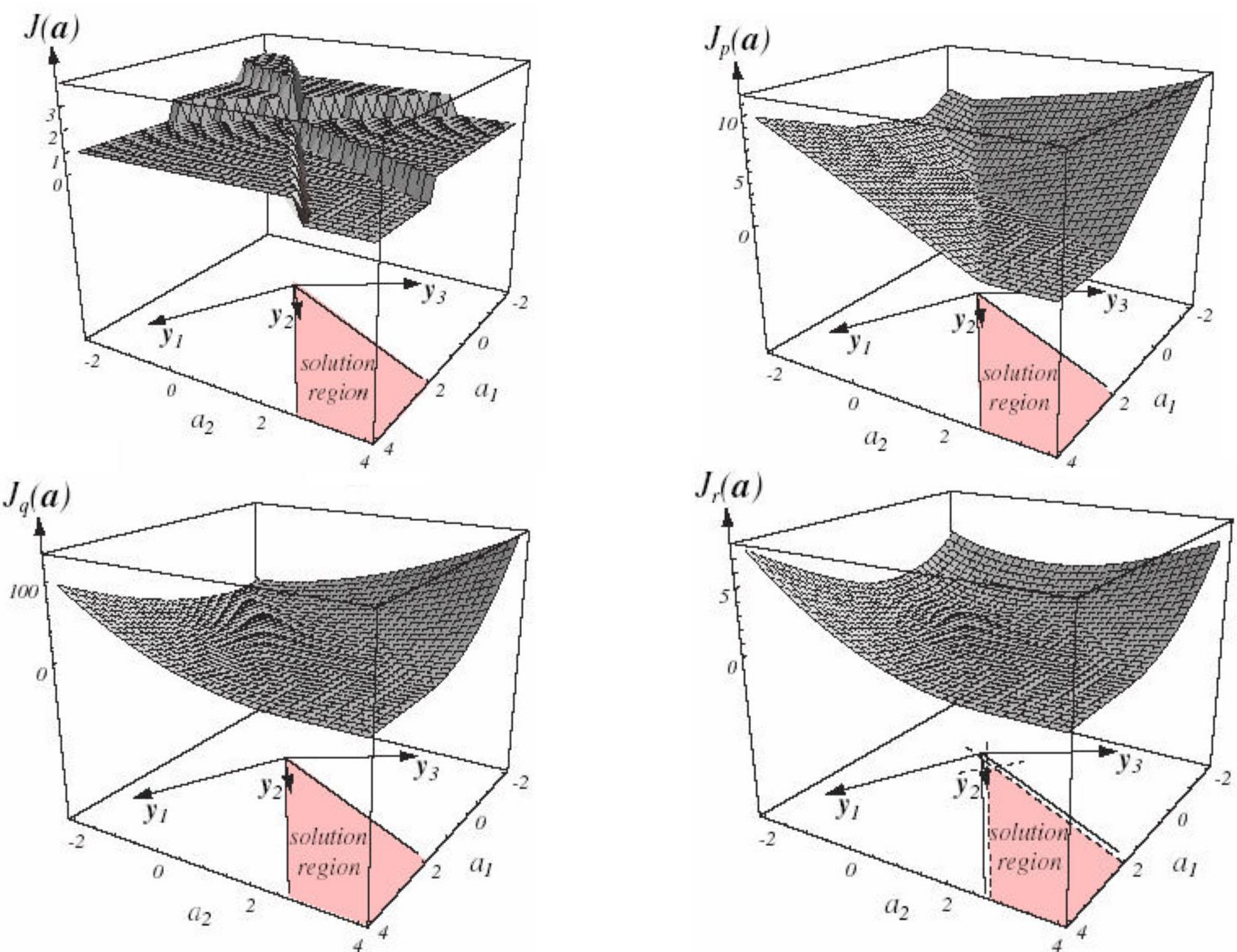
梯度连续

规范化平方（裕量）误差判据：

$$J_r(\mathbf{a})=\sum_{\mathbf{y}\in Y}\frac{(\mathbf{a}^{\mathrm{T}}\mathbf{y}-b)^2}{\|\mathbf{y}\|^2}$$

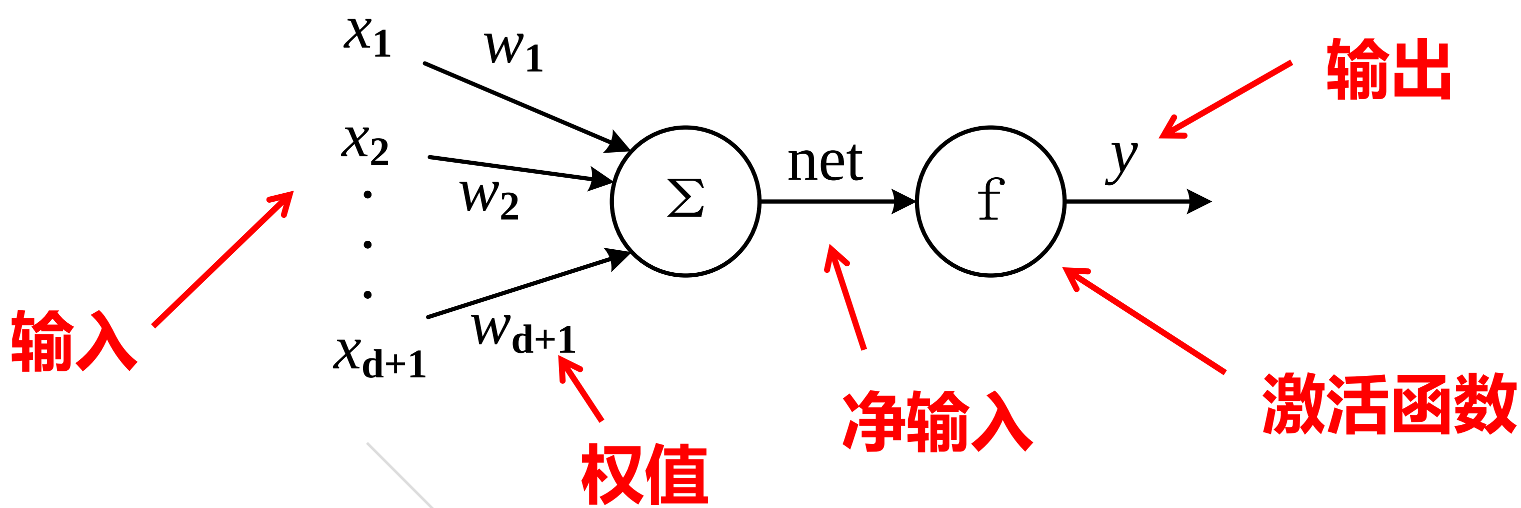
克服边界点及$\|\mathbf{y}\|$的影响

松弛算法


J(a)
3
2
1
0
y1
y2
y3
solution region
-2
0
2
4
a1
a2
Jp(a)
10
5
0
Jq(a)
100
0
Jr(a)
5
0

3 感知器网络

- 1943年McCulloch和Pitt提出了人工神经元模型

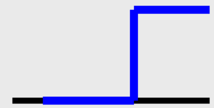
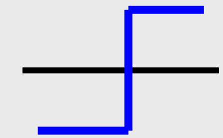
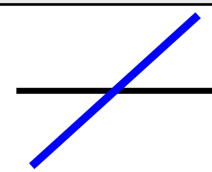
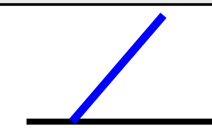
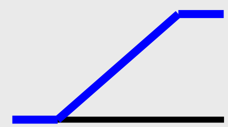
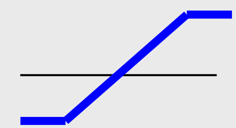
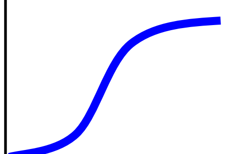
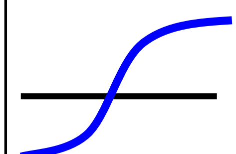


$$net = \sum_{i=1}^{d+1} x_i w_i = \mathbf{w}^t \mathbf{x} \qquad y = \underline{f(net)} = f\left(\mathbf{w}^t \mathbf{x}\right)$$

当 f 为符号函数时，“神经元”等价于“线性判别函数”

$$f(net) = \begin{cases} -1, & net < 0 \\ +1, & net \geq 0 \end{cases}$$

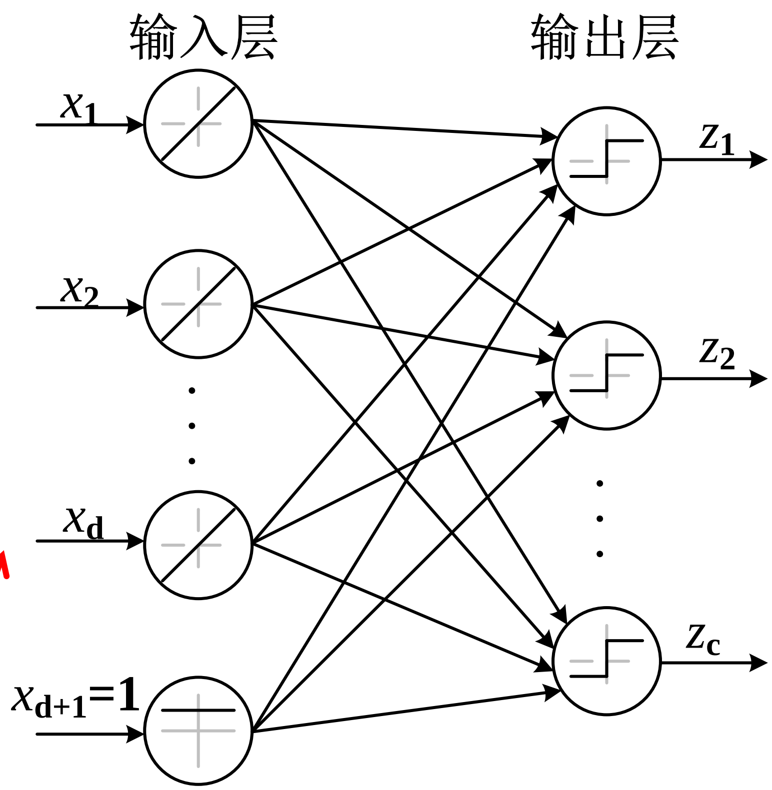
激活函数（传输函数）

名称	输入n/输出y	图标	名称	输入n/输出y	图标
硬极限	$y=0, n<0$ $y=1, n\ge 0$		对称硬极限	$y=-1, n<0$ $y=1, n\ge 0$	
线性	$y=n$		正线性	$y=0, n<0$ $y=n, n\ge 0$	
饱和线性	$y=0, n<0$ $y=n, 0\le n<1$ $y=1, n\ge 1$		对称饱和线性	$y=0, n<0$ $y=n, 0\le n<1$ $y=1, n\ge 1$	
对数-S型	$y=\dfrac{1}{1+e^{-n}}$		双曲正切S型	$y=\dfrac{e^{n}-e^{-n}}{e^{n}+e^{-n}}$	
竞争	$y=1$,具有最大n的神经元 $y=0$,所有其他神经元				C

ISBN 978-7-5603-4763-9

3 感知器网络

- 两层感知器网络（线性网络）
  - 需要解决多个类别分类问题，由多个神经元构成一个神经网络



输出：可用多种方式
1）直接编码
2）进制编码
3）最大值

学习：网络结构、激活函数已确定，如何学习连接权值w?
——最小平方误差法

输入：d+1维增广特征矢量

ISBN 978-7-5603-4763-9

3 感知器网络

两层感知器网络的学习

- 将所有的训练样本写成“样本矩阵”，以及对应的“期望输出矩阵”

$$\mathbf{Y}=\begin{pmatrix} x_{11} & \cdots & x_{1d} & 1 \\ x_{12} & \cdots & x_{2d} & 1 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ x_{n1} & \cdots & x_{nd} & 1 \end{pmatrix} \qquad \mathbf{T}=\begin{pmatrix} t_{11} & \cdots & t_{1c} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ t_{n1} & \cdots & t_{nc} \end{pmatrix}$$

- 输出层神经元权值写成矩阵形式，每列对应一个神经元的权值矢量

$$\mathbf{W}=\begin{pmatrix} w_{11} & \cdots & w_{c1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ w_{1d+1} & \cdots & w_{cd+1} \end{pmatrix}$$

- 构建矩阵方程 $\mathbf{YW}=\mathbf{T}$，采用最小平方误差法求近似解。

伪逆法

梯度下降法

3感知器网络

两层感知器网络的学习

目标函数		$\mathbf{YW}=\mathbf{T}$
最小平方误差代价函数		$\min\limits_{\mathbf{W}} J(\mathbf{W})=\left\Vert \mathbf{YW}-\mathbf{T}\right\Vert_F^2$ $\Vert\bullet\Vert_F$ 矩阵的Frobenius范数$\Vert\mathbf{A}\Vert_F=\sqrt{\sum\limits_{i,j}a_{ij}^2}$
代价函数求导		$\nabla J(\mathbf{W})=\mathbf{Y}^t(\mathbf{YW}-\mathbf{T})$
求解	伪逆法	$\nabla J(\mathbf{W})=0 \longrightarrow \mathbf{W}=\left(\mathbf{Y}^t\mathbf{Y}\right)^{-1}\mathbf{Y}^t\mathbf{T}=\mathbf{Y}^+\mathbf{T}$
	梯度下降法	$\mathbf{W}(k+1)=\mathbf{W}(k)-\eta(k)\mathbf{Y}^t\left[\mathbf{YW}(k)-\mathbf{T}\right]$

4多层感知器网络

多层感知器网络（MLP，Multi-Layer Perception）

误差反向传播算法（BP，Backpropagation）

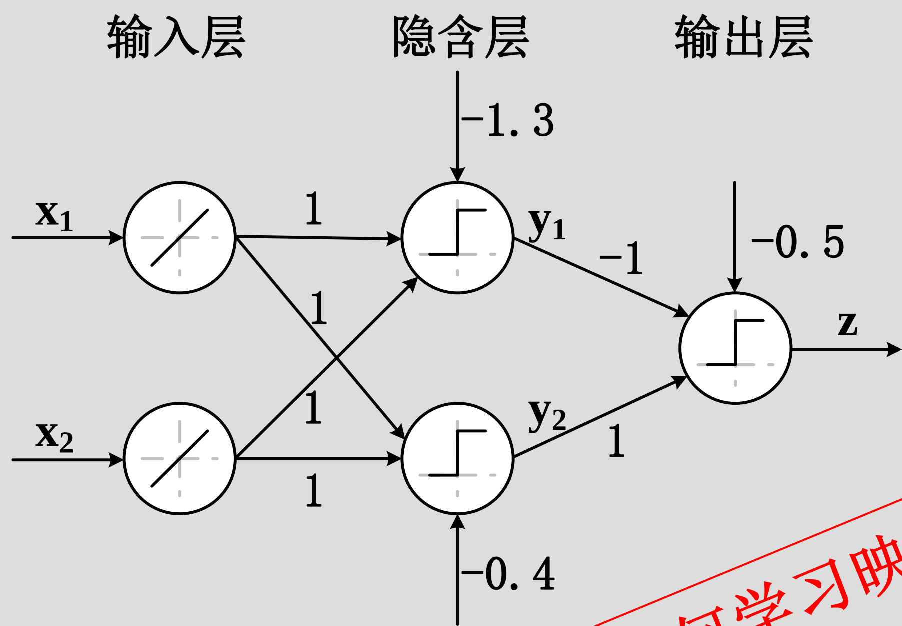
优化方法

实践

4.1 解决XOR问题的多层感知器

网络结构：

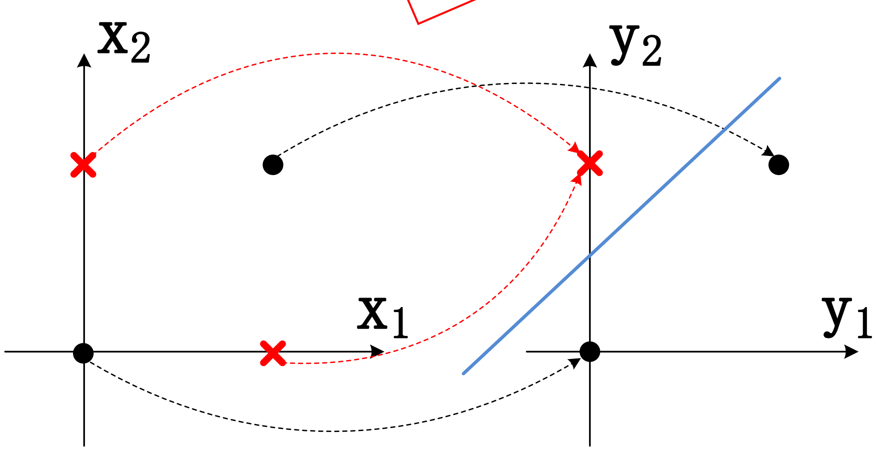
输入层采用线性激活函数，隐含层和输出层节点采用0-1阶跃激活函数



如何设计通用的网络结构？

如何学习映射参数？

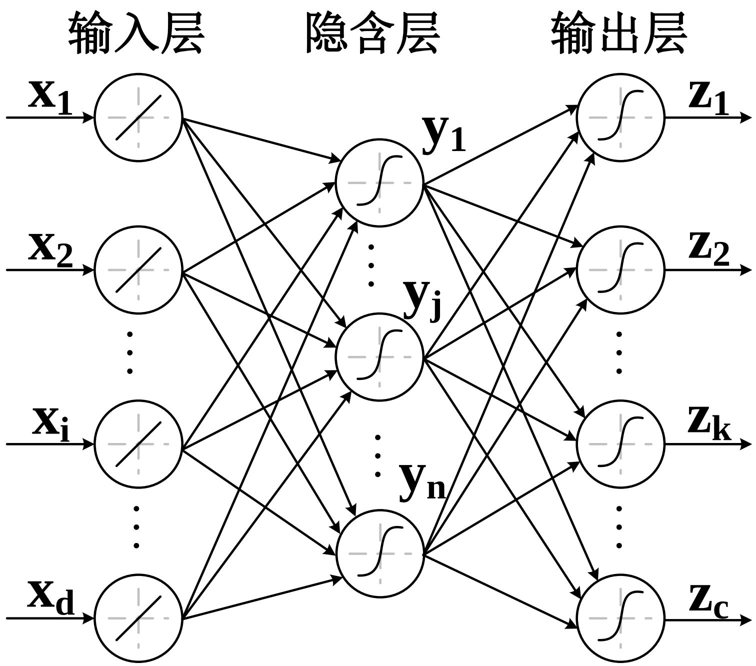
非线性映射：



隐含层对原特征进行非线性映射，输出层进行线性判别。

ISBN 978-7-5603-4763-9

4.2 多层感知器的结构



选定层数： 通常采用三层网络，增加网络层数并不能提高网络的分类能力；

输入层： 输入层节点数为输入特征的维数d，映射函数采用线性函数；

隐含层： 隐含层节点数需要设定，一般来说，隐层节点数越多，网络的分类能力越强，映射函数一般采用Sigmoid函数；

输出层： 输出层节点数可以等于类别数c，也可以采用编码输出的方式，少于类别数c，输出函数可以采用线性函数或Sigmoid函数。

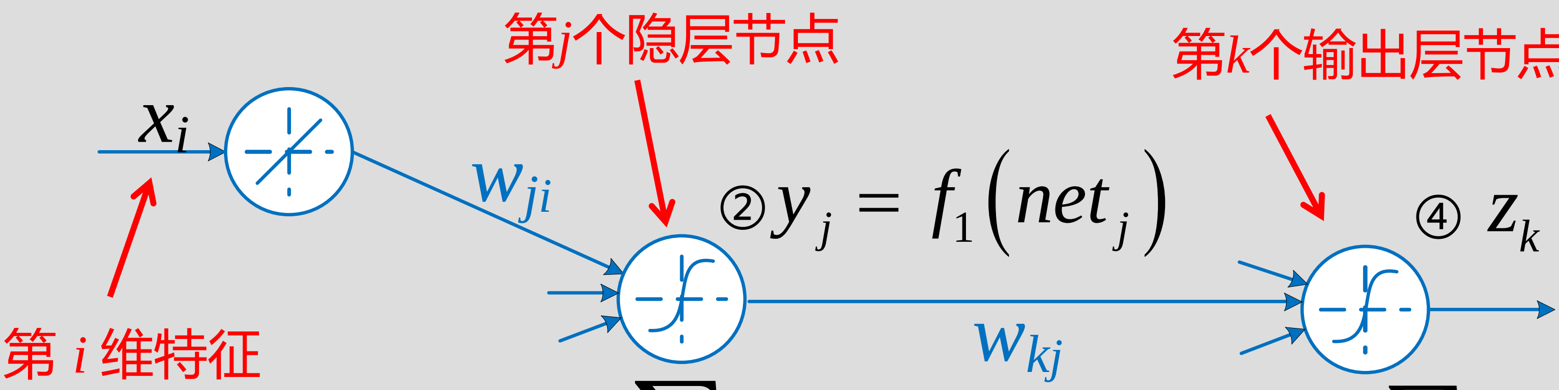
Sigmoid型激活函数：

对数型 $$f(u)=\frac{1}{1+e^{-u}}$$

双曲正切型 $$f(u)=\frac{e^{u}-e^{-u}}{e^{u}+e^{-u}}$$

ISBN 978-7-5603-4763-9

三层网络的传输过程



② $y_j = f_1\left(net_j\right)$

④ $z_k = f_2\left(net_k\right)$

① $net_j = \sum w_{ji} x_i$

③ $net_k = \sum w_{kj} y_j$

输出层第k节点输出：

共 n_H 个隐层节点

共 d 维特征

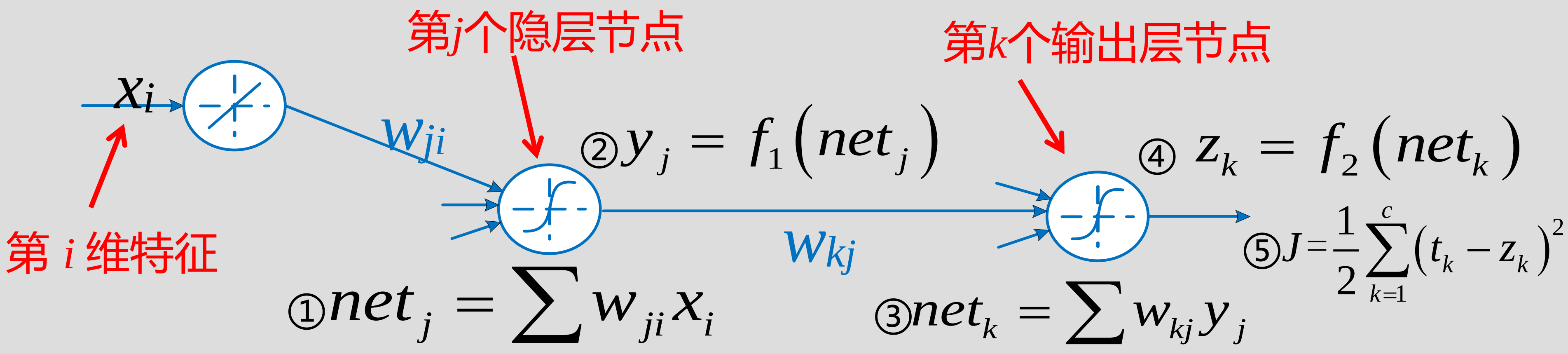
第j隐节点偏置

第k输出节点偏置

$$z_k(\mathbf{x}) = f_2\left(\sum_{j=1}^{n_H} w_{kj} \underbrace{f_1\left(\sum_{i=1}^{d} w_{ji} x_i + w_{j0}\right)}_{y_j} + w_{k0}\right)$$

ISBN 978-7-5603-4763-9

误差反向传播算法（BP，Backpropagation algorithm）



BP算法：训练样本 **x**，期望输出 **t**，网络实际输出 **z**，基于误差最小化的梯度下降法，求解连接权值 **w**=｛w_{ji}，w_{kj}｝

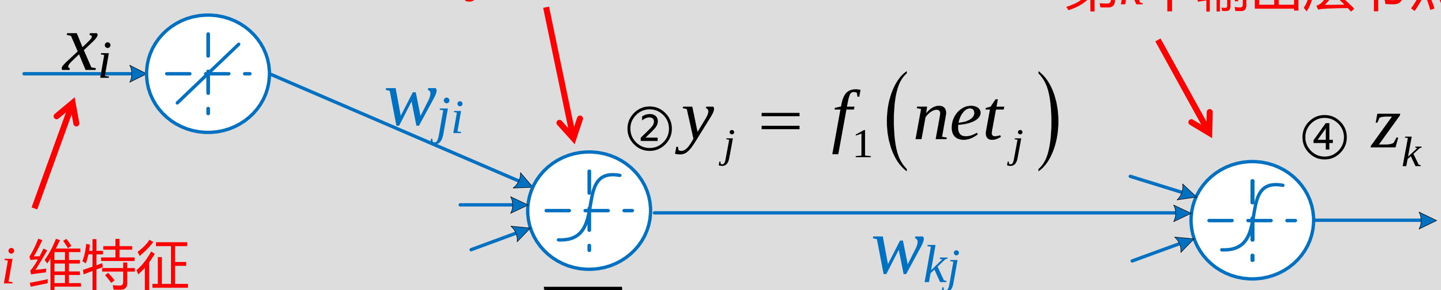
目标（误差）函数：$J(\mathbf{w}) = \frac{1}{2}\|\mathbf{t}-\mathbf{z}\|^2 = \frac{1}{2}\sum_{k=1}^{c}(t_k - z_k)^2$

如何求导？

梯度下降：$\mathbf{w}(m+1) = \mathbf{w}(m) + \Delta\mathbf{w}(m) = \mathbf{w}(m) - \eta\frac{\partial J}{\partial \mathbf{w}}$

ISBN 978-7-5603-4763-9

误差反向传播——链式求导



② $y_j = f_1(net_j)$　　④ $z_k = f_2(net_k)$

① $net_j = \sum w_{ji} x_i$　　③ $net_k = \sum w_{kj} y_j$

链式求导：计算误差函数对“隐含—输出”连接权值 w_{kj}，“输入—隐含层”连接权值 w_{ji}的导数

$$\frac{\partial J}{\partial w_{kj}} = \frac{\partial J}{\partial z_k}\frac{\partial z_k}{\partial net_k}\frac{\partial net_k}{\partial w_{kj}} \qquad \frac{\partial J}{\partial w_{ji}} = \frac{\partial J}{\partial y_j}\frac{\partial y_j}{\partial net_j}\frac{\partial net_j}{\partial w_{ji}}$$

——误差函数 J 沿着公式⑤-④-③-②-①反向传播

ISBN 978-7-5603-4763-9

BP算法基本思路

1）为了使目标函数 $J(\mathbf{w})=\frac{1}{2}\|\mathbf{t}-\mathbf{z}\|^2$ 最小化，需要采用梯度下降法搜索最佳**w**：

$$\mathbf{w}(m+1)=\mathbf{w}(m)-\eta\frac{\partial J}{\partial \mathbf{w}}$$

2）为了采用梯度下降法，需要计算导数： $\frac{\partial J}{\partial \mathbf{w}}$

3）**W**分为两部分，采用链式法则求导：

$$\frac{\partial J}{\partial w_{ji}}=\frac{\partial J}{\partial net_j}\frac{\partial net_j}{\partial w_{ji}} \qquad \frac{\partial J}{\partial w_{kj}}=\frac{\partial J}{\partial net_k}\frac{\partial net_k}{\partial w_{kj}}$$

ISBN 978-7-5603-4763-9

Sigmoid激活函数求导

对数Sigmoid 函数： $$f(x)=\frac{1}{1+e^{-x}}$$

导数： $$f'(x)=\frac{e^{-x}}{\left(1+e^{-x}\right)^2}=\frac{1}{1+e^{-x}}-\frac{1}{\left(1+e^{-x}\right)^2}=f(x)\left(1-f(x)\right)$$

应用该激活函数时，输出层及隐含层的导数形式为：

输出层： $$f'\left(net_k\right)=f\left(net_k\right)\left(1-f\left(net_k\right)\right)=z_k\left(1-z_k\right)$$

隐含层： $$f'\left(net_j\right)=f\left(net_j\right)\left(1-f\left(net_j\right)\right)=y_j\left(1-y_j\right)$$

ISBN 978-7-5603-4763-9

Sigmoid激活函数

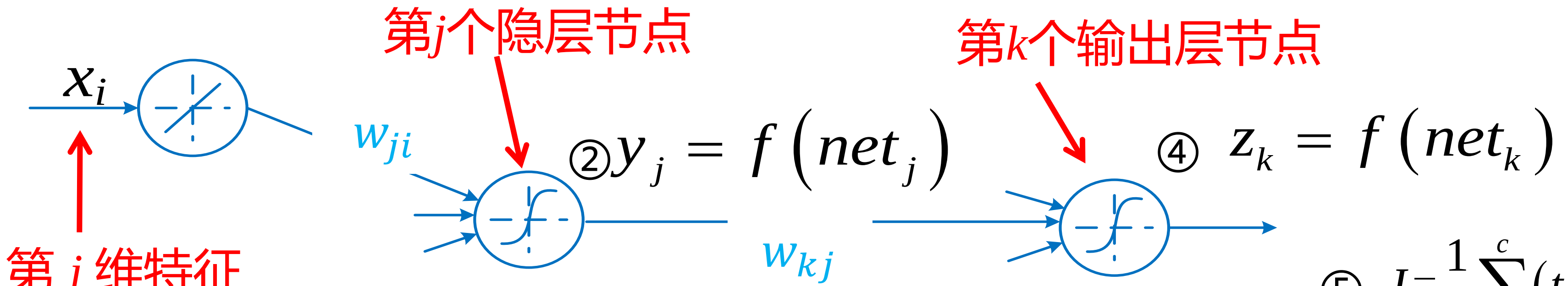
- 双曲Sigmoid激活函数

$$f(x)=\frac{e^{x}-e^{-x}}{e^{x}+e^{-x}}$$

请证明应用该激活函数时，输出层及隐含层的导数形式为

输出层：$$f'(net_k)=1-f^2(net_k)=1-z_k^2$$

隐含层：$$f'(net_k)=1-f^2(net_j)=1-y_j^2$$



① $net_j = \sum w_{ji} x_i$

② $y_j = f\left(net_j\right)$

③ $net_k = \sum w_{kj} y_j$

④ $z_k = f\left(net_k\right)$

⑤ $J = \frac{1}{2}\sum_{k=1}^{c}\left(t_k - z_k\right)^2$

输出层求导：

$$\frac{\partial J}{\partial w_{kj}} = \frac{\partial J}{\partial z_k}\frac{\partial z_k}{\partial net_k}\frac{\partial net_k}{\partial w_{kj}}$$

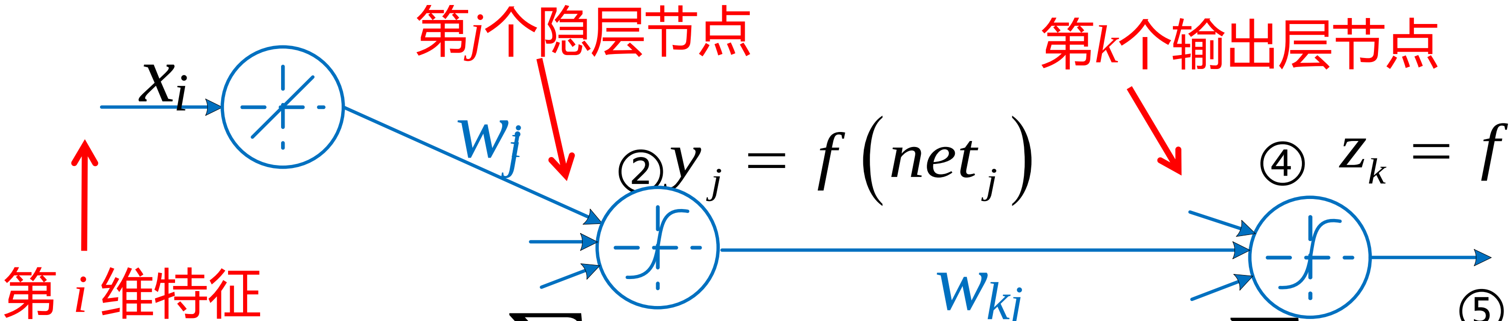
由⑤得：$\frac{\partial J}{\partial z_k} = -\left(t_k - z_k\right)$

由④得：$\frac{\partial z_k}{\partial net_k} = f'\left(net_k\right)$

由③得：$\frac{\partial net_k}{\partial w_{kj}} = y_j$

$$\frac{\partial J}{\partial w_{kj}} = -\underline{\left(t_k - z_k\right) f'\left(net_k\right)} y_j = -\delta_k y_j$$

令$\delta_k = \left(t_k - z_k\right) f'\left(net_k\right)$



② $y_j = f\left(net_j\right)$

④ $z_k = f\left(net_k\right)$

① $net_j = \sum w_{ji} x_i$

③ $net_k = \sum w_{kj} y_j$

⑤ $J = \frac{1}{2}\sum_{k=1}^{c}\left(t_k - z_k\right)^2$

隐含层

$$\frac{\partial J}{\partial w_{ji}} = \frac{\partial J}{\partial y_j}\frac{\partial y_j}{\partial net_j}\frac{\partial net_j}{\partial w_{ji}}$$

由①得: $\frac{\partial net_j}{\partial w_{ji}} = \frac{\partial}{\partial w_{ji}}\left(\sum_{m=1}^{d} w_{jm} x_m\right) = x_i$

由②得: $\frac{\partial y_j}{\partial net_j} = f'\left(net_j\right)$

⑤

$$\frac{\partial J}{\partial y_j} = \frac{\partial}{\partial y_j}\left[\frac{1}{2}\sum_{k=1}^{c}\left(t_k - z_k\right)^2\right] = -\sum_{k=1}^{c}\left(t_k - z_k\right)\frac{\partial z_k}{\partial y_j}$$

$$= -\sum_{k=1}^{c}\left(t_k - z_k\right)\frac{\partial z_k}{\partial net_k}\frac{\partial net_k}{\partial y_j} = -\sum_{k=1}^{c}\underbrace{\left(t_k - z_k\right) f'\left(net_k\right)}_{\delta_k} w_{kj} = -\sum_{k=1}^{c}\delta_k w_{kj}$$

隐含层 $$\frac{\partial J}{\partial w_{ji}} = \frac{\partial J}{\partial y_j}\frac{\partial y_j}{\partial net_j}\frac{\partial net_j}{\partial w_{ji}}$$

$$\frac{\partial J}{\partial y_j} = -\sum_{k=1}^{c}\delta_k w_{kj}$$

$$\frac{\partial y_j}{\partial net_j} = f'\left(net_j\right)$$

$$\frac{\partial net_j}{\partial w_{ji}} = \frac{\partial}{\partial w_{ji}}\left(\sum_{m=1}^{d} w_{jm}x_m\right) = x_i$$

$$\frac{\partial J}{\partial w_{ji}} = -\left[\sum_{k=1}^{c}\delta_k w_{kj}\right] f'\left(net_j\right)x_i = -\delta_j x_i$$

令 $\delta_j = \left(\sum_{k=1}^{c}\delta_k w_{kj}\right) f'\left(net_j\right)$

ISBN 978-7-5603-4763-9

迭代公式

- 输出层：

$$\delta_k = (t_k - z_k) f'(net_k)$$

$$\frac{\partial J}{\partial w_{kj}} = -\delta_k y_j,$$

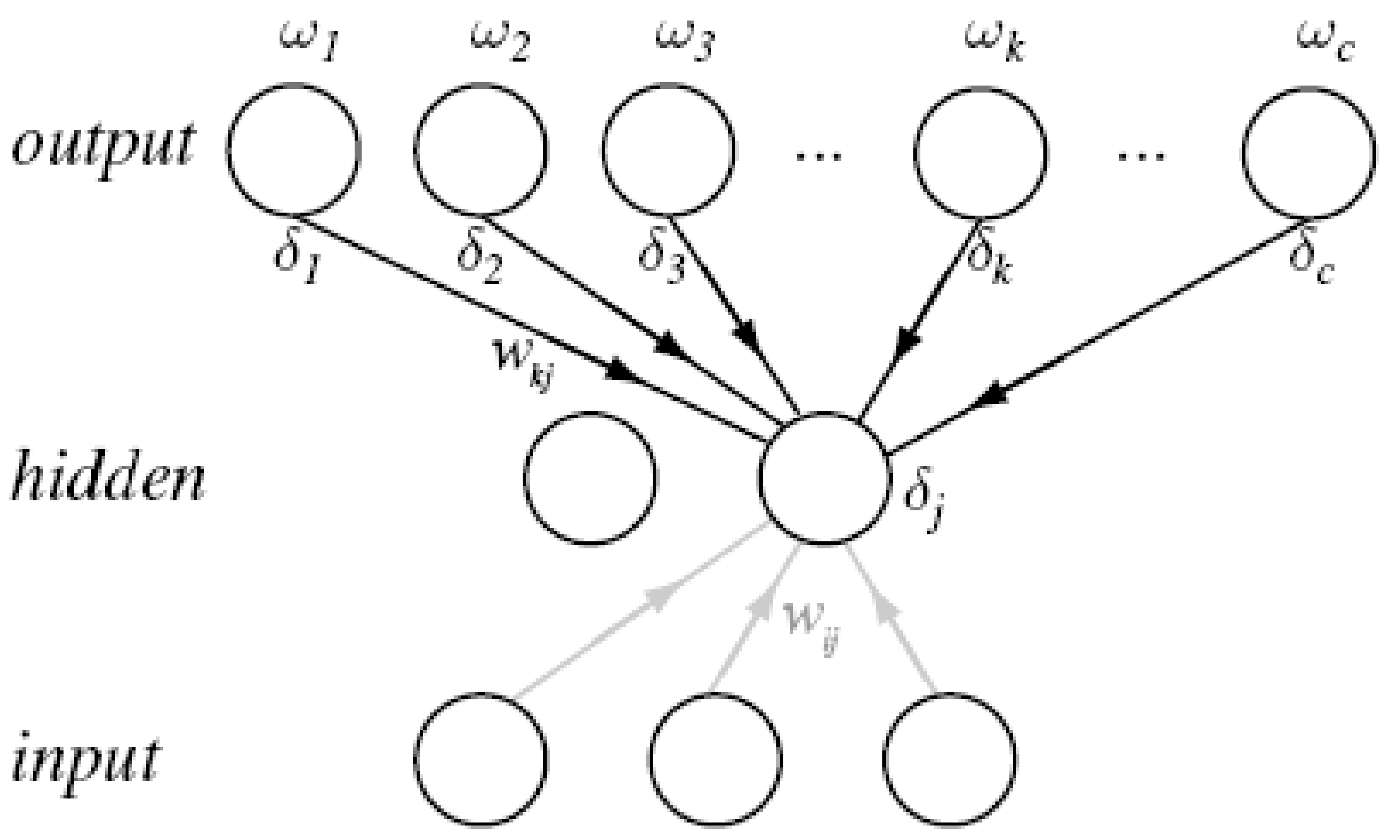
- 隐含层：

$$\frac{\partial J}{\partial w_{ji}} = -\delta_j x_i,$$

$$\delta_j = f'(net_j) \sum_{k=1}^{c} \delta_k w_{kj}$$

ISBN 978-7-5603-4763-9

误差反向传播



BP算法—批量修改

begin initialize n_H, $\mathbf{w}$, θ, η, $r \leftarrow 0$

  do $r \leftarrow r+1$

    $m \leftarrow 0; \Delta w_{ji} \leftarrow 0; \Delta w_{kj} \leftarrow 0$

    do $m \leftarrow m+1$

      $\mathbf{x}_m \leftarrow$ select pattern

      $\Delta w_{ji} \leftarrow \Delta w_{ji} + \eta \delta_j x_i$; $\Delta w_{kj} \leftarrow \Delta w_{kj} + \eta \delta_k y_j$

    until $m = n$

    $w_{ji} \leftarrow w_{ji} + \Delta w_{ji}$; $w_{kj} \leftarrow w_{kj} + \Delta w_{kj}$

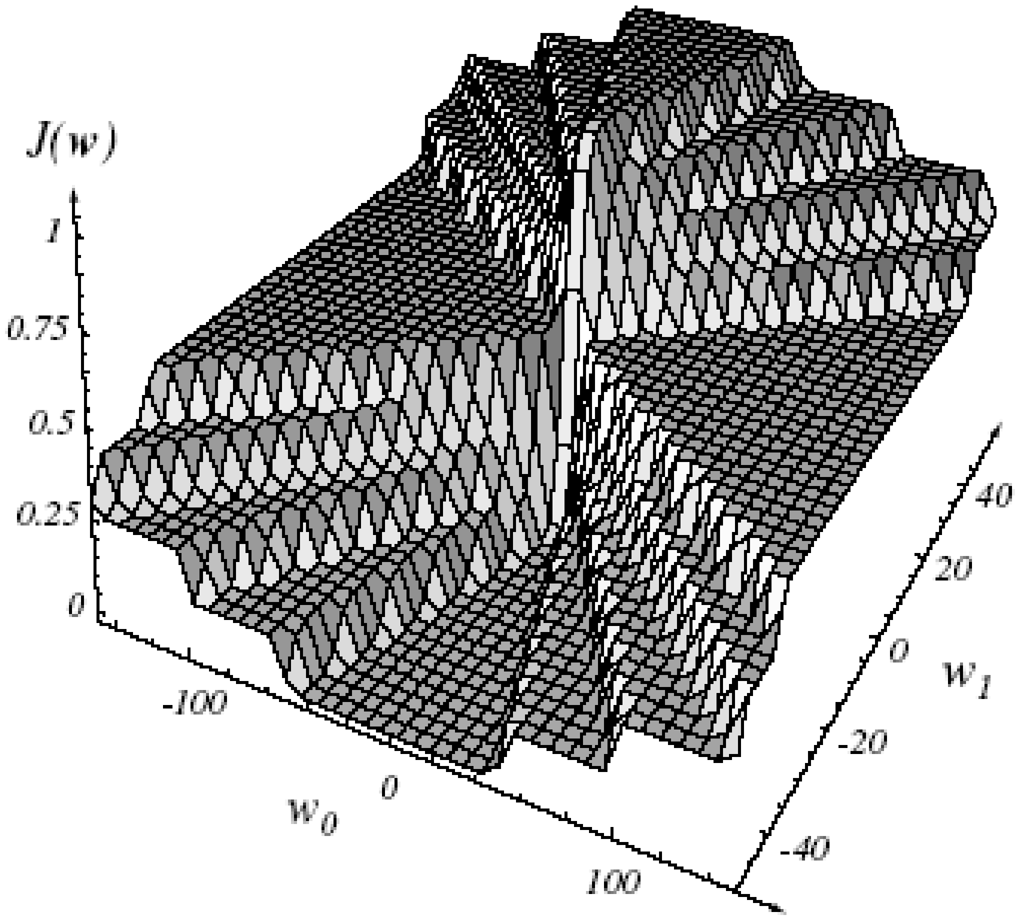
  until $\|\nabla J(\mathbf{w})\| < \theta$

  return $\mathbf{w}$

end

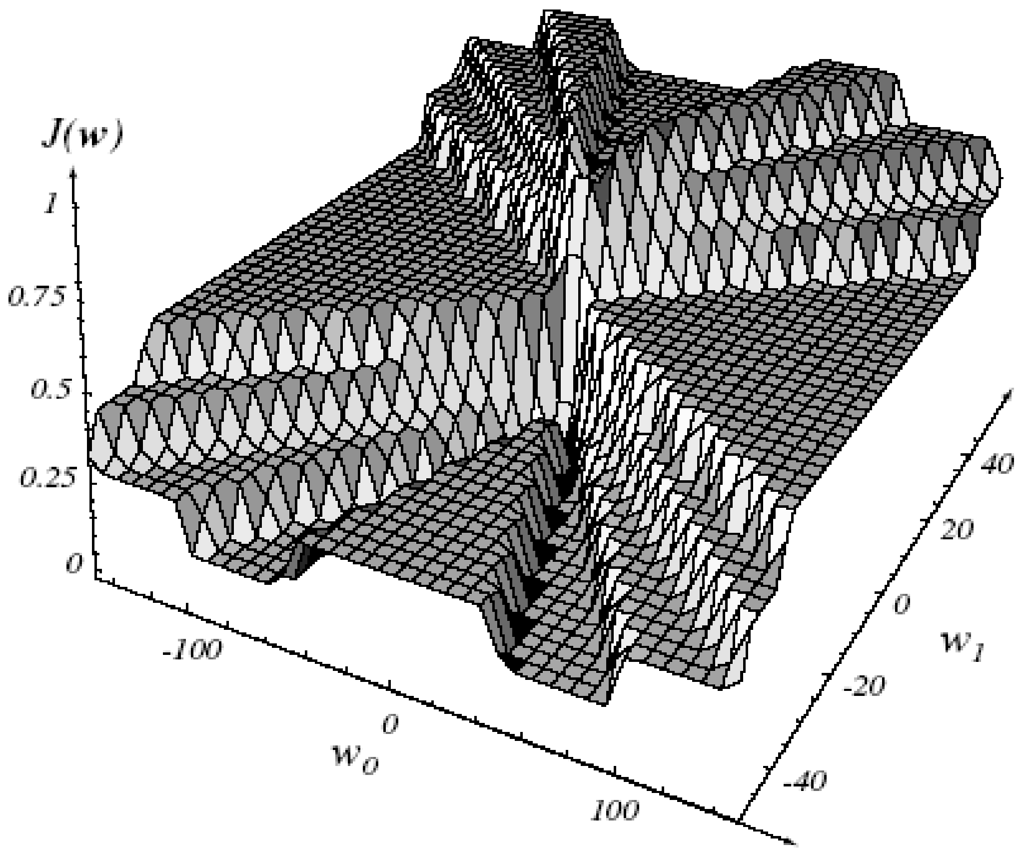
多层感知器网络存在的问题

1. BP算法的*收敛速度*一般来说比较慢；



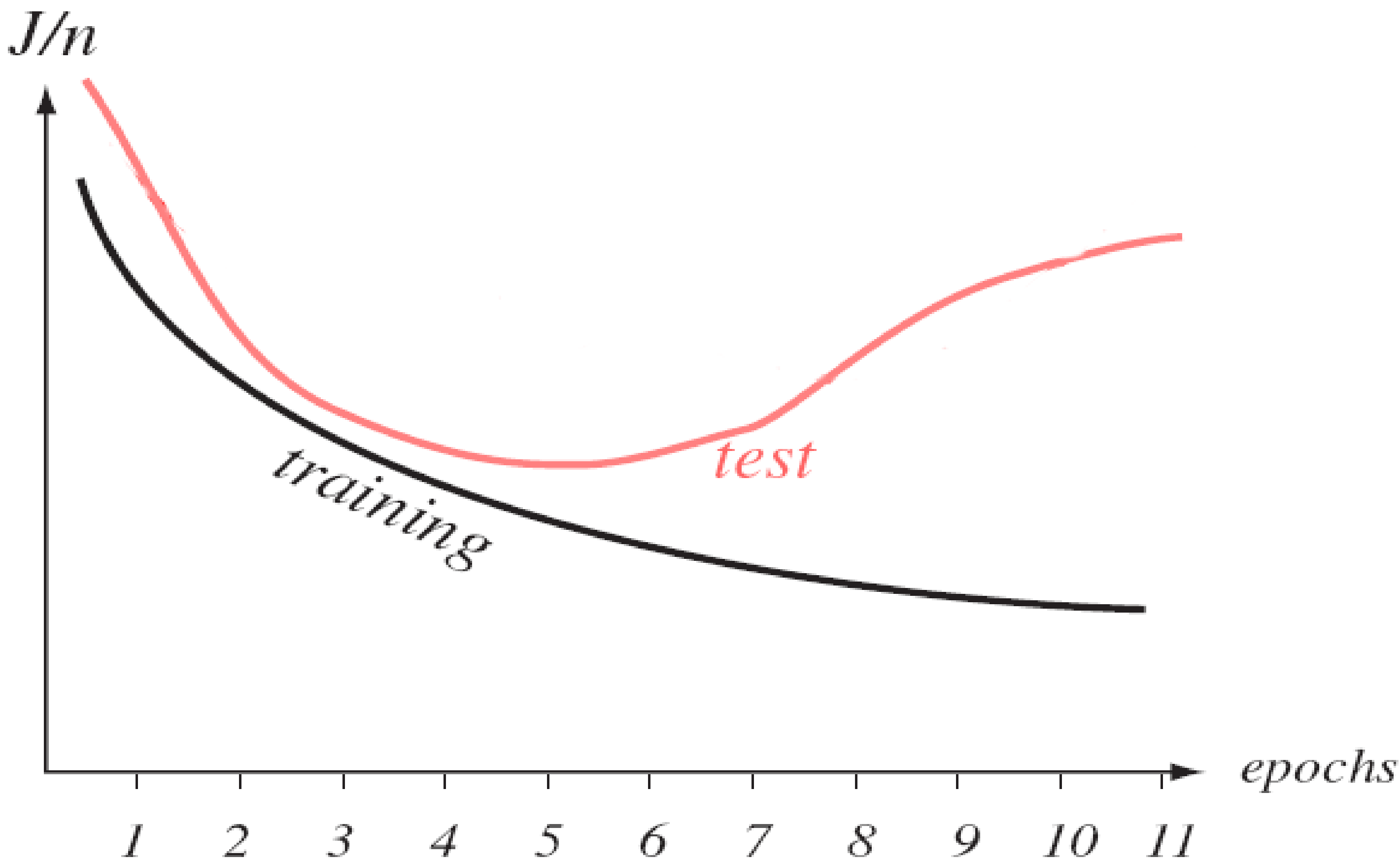
多层感知器网络存在的问题

2. BP算法只能收敛于*局部最优解*，不能保证收敛于全局最优解；



多层感知器网络存在的问题

3. 当隐层元的数量足够多时，网络对训练样本的识别率很高，但对测试样本的识别率有可能很差，即网络的



ISBN 978-7-5603-4763-9

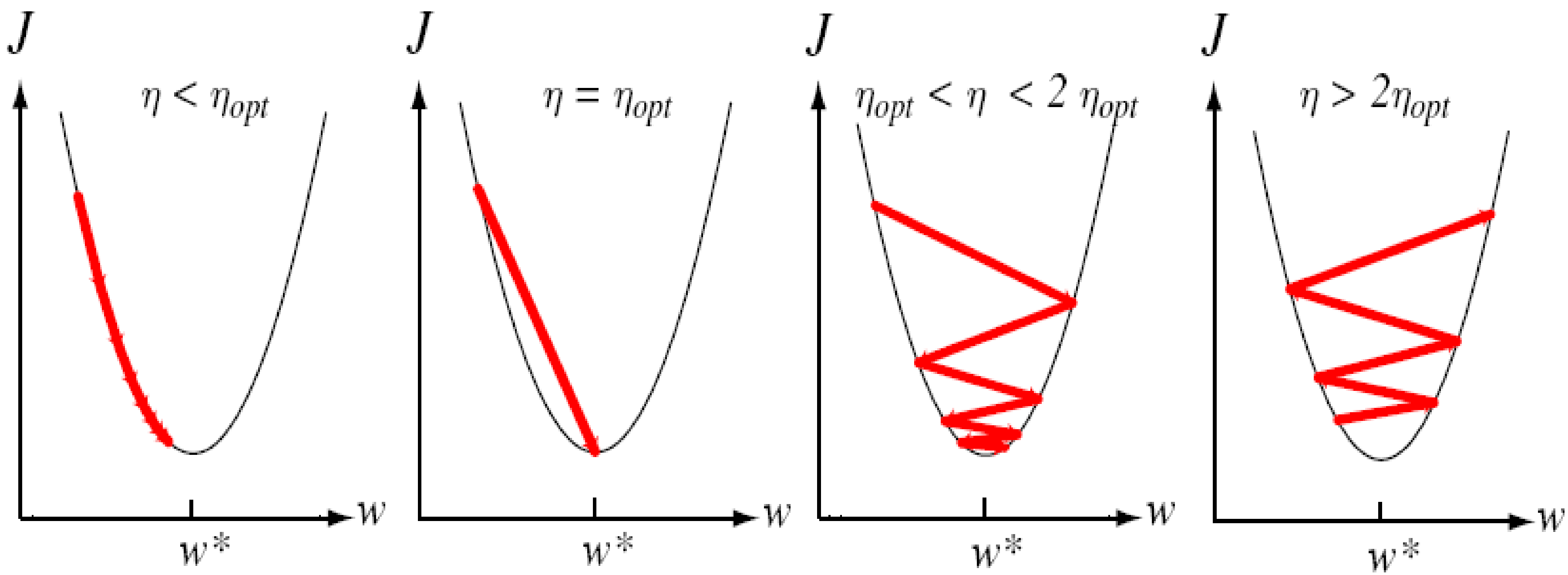
BP算法的一些实用技术

- 激活函数的选择：一般可以选择双曲型的Sigmoid函数；
- 目标值：期望输出一般选择(-1,+1)或(0,1)；
- 规格化：训练样本每个特征一般要规格化为0均值和标准差；
- 权值初始化：期望每个神经元的-1<net<+1，因此权值一般初始化为 $-1/\sqrt{d} < w < 1/\sqrt{d}$ ；
- 学习率的选择：太大容易发散，太小则收敛较慢；

ISBN 978-7-5603-4763-9

提高收敛速度的方法

- 一个比较直观的想法是通过增大学习率来提高收敛速度，但这样有可能造成算法发散。



一阶技术——梯度下降法

- 目标函数的一阶泰勒级数展开：

$$J\left(\mathbf{w}_{k+1}\right)=J\left(\mathbf{w}_k+\Delta\mathbf{w}_k\right)\approx J\left(\mathbf{w}_k\right)+\left(\left.\frac{\partial J\left(\mathbf{w}\right)}{\partial\mathbf{w}}\right|_{\mathbf{w}=\mathbf{w}_k}\right)^T\Delta\mathbf{w}_k$$

目标函数增量：

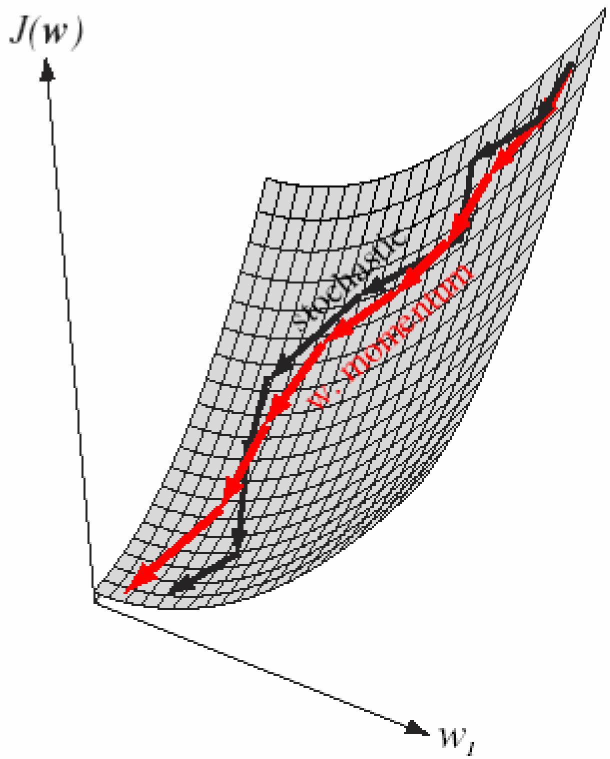
$$\Delta J\left(\mathbf{w}_k\right)=\left(\left.\frac{\partial J\left(\mathbf{w}\right)}{\partial\mathbf{w}}\right|_{\mathbf{w}=\mathbf{w}_k}\right)^T\Delta\mathbf{w}_k\le 0$$

使目标函数下降最大：

$$\Delta\mathbf{w}_k=-\left(\left.\frac{\partial J\left(\mathbf{w}\right)}{\partial\mathbf{w}}\right|_{\mathbf{w}=\mathbf{w}_k}\right)^T$$

ISBN 978-7-5603-4763-9

冲量项



$$\Delta\mathbf{w}(m)=\mathbf{w}(m)-\mathbf{w}(m-1)$$

减少总体梯度方向的偏离，
加快学习速度

$$\mathbf{w}(m+1)=\mathbf{w}(m)+(1-\alpha)\Delta\mathbf{w}_{bp}(m)+\alpha\Delta\mathbf{w}(m-1)$$

ISBN 978-7-5603-4763-9

权值衰减

对误差函数不起作用的权值，将逐步减小。等价于引入正则项：

$$J_{ef}=J(\mathbf{w})+\frac{2\varepsilon}{\eta}\mathbf{w}^t\mathbf{w}$$

正则项，优先惩罚较大的权值

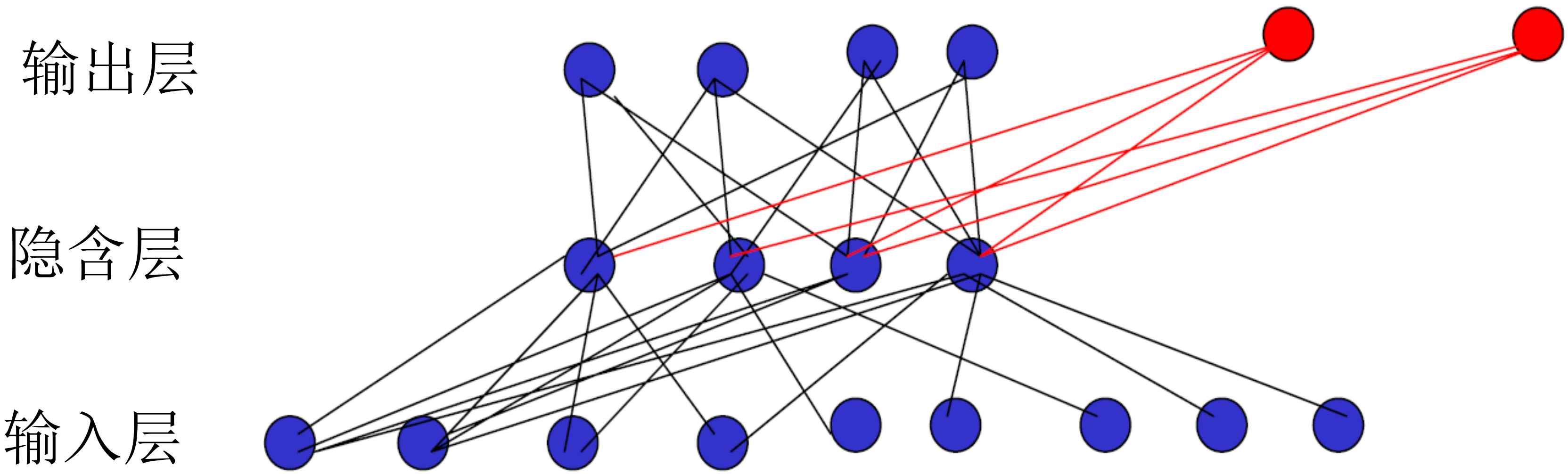
$$\mathbf{w}^{new}=\mathbf{w}^{old}(1-\varepsilon)\qquad 0<\varepsilon<1$$

$$J_{ef}=J(\mathbf{w})+\frac{2\varepsilon}{\eta}\sum_{i,j}\frac{w_{i,j}^2/\mathbf{w}^t\mathbf{w}}{1+w_{i,j}^2/\mathbf{w}^t\mathbf{w}}$$

使用衰减参数，将惩罚分散于整个网络

线索（hint）

增加输出单元来执行附加问题，有助于提高分类能力



ISBN 978-7-5603-4763-9