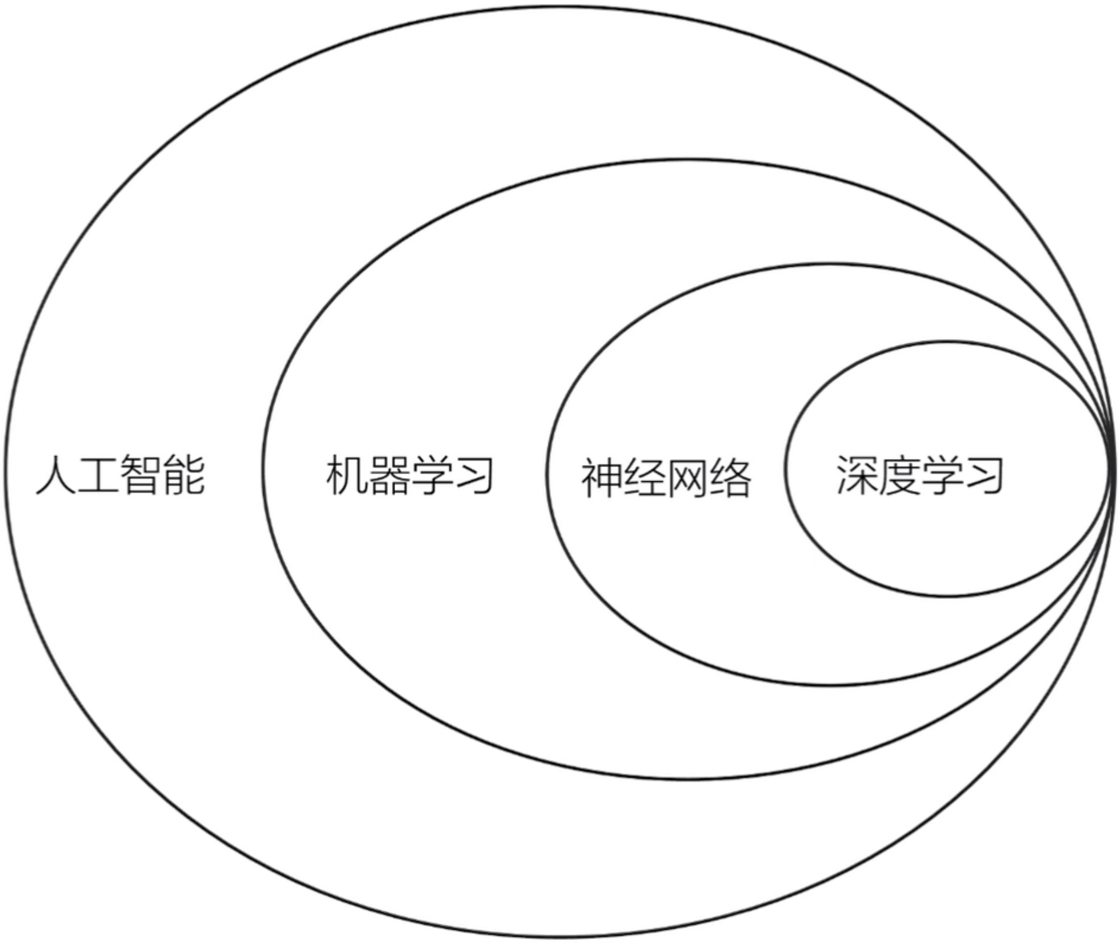
Chapter 2 神经网络基础

2.1 从机器学习到神经网络I

包含关系

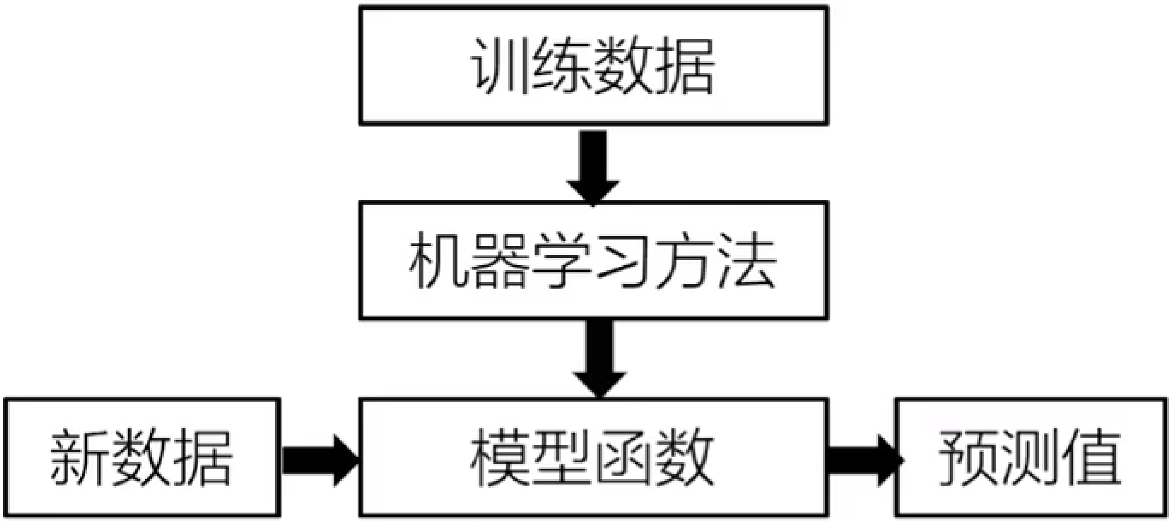
人工智能→机器学习→神经网络→深度学习



机器学习相关概念

- 机器学习是对能通过经验自动改进的计算机算法的研究；
- 机器学习使用数据或以往的经验，以此提升计算机程序的能力；
- 机器学习是研究如何通过计算的手段、利用经验来改善系统自身性能的一门学科；
- 典型机器学习过程如下：

典型机器学习过程



符号说明

1. 输入数据：x
2. 真实值（实际值）：y
3. 计算值（模型输出值）：$\hat{y}$
4. 模型函数：$H(x)$
5. 激活函数：$G(x)$
6. 损失函数：$L(x)$
7. 标量：斜体小写字母，a、b、c
8. 向量：黑斜体小写字母，$\boldsymbol{a}$、$\boldsymbol{b}$、$\boldsymbol{c}$
9. 矩阵：黑斜体大写字母，$\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{B}$、$\boldsymbol{C}$

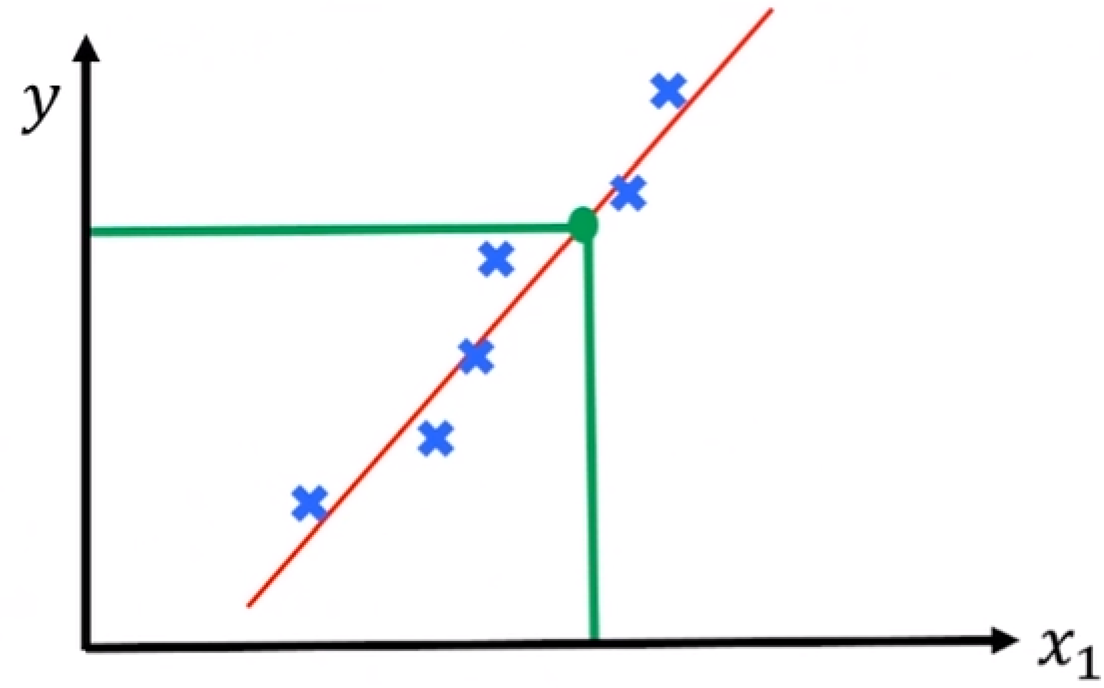
线性回归

什么是回归(regression)和线性回归？

单变量线性回归模型（一元）

线性回归可以找到一些点的集合背后的规律：一个点集可以用一条直线来拟合，这条拟合出来的直线的参数特征，就是线性回归找到的点集背后的规律。

单变量线性模型：$H_w(x) = w_0 + wx$



多变量线性回归模型

两个特征：$H_w(x) = w_0 + w_1x_1 + w_2x_2$

n个特征：
$H_w(x) = \sum_{i=0}^{n} w_i x_i = \hat{\boldsymbol{w}}^T \boldsymbol{x}, \quad \hat{\boldsymbol{w}} = [w_0; w_1; \cdots; w_n], \quad \boldsymbol{x} = [x_0; x_1; \cdots; x_n], \quad x_0 = 1$

线性函数拟合得好不好？模型预测值$\hat{y}$与真实值y存在误差：$\varepsilon = y - \hat{y} = y - \hat{\boldsymbol{w}}^T \boldsymbol{x}$

ε满足$N(0, \sigma^2)$高斯分布→最大似然估计→损失函数：$L(\hat{\boldsymbol{w}}) = \dfrac{1}{2} \sum_{j=1}^{m} (\hat{\boldsymbol{w}}^T \boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}_j)^2$

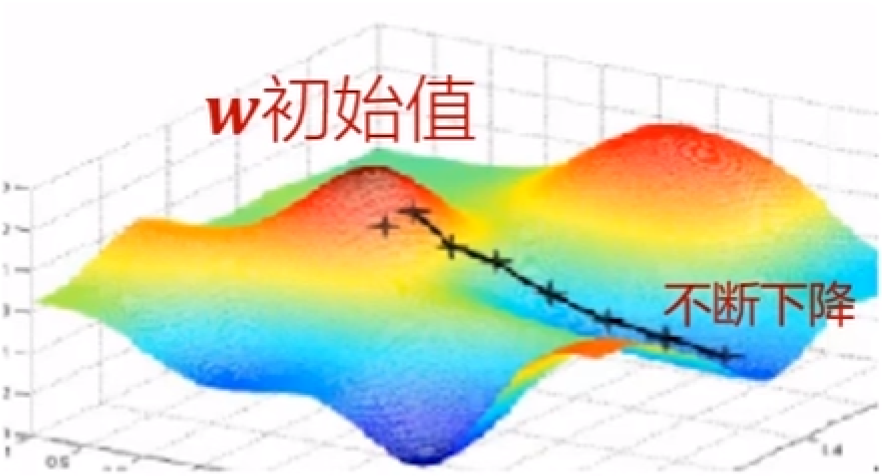
寻找参数$\hat{\boldsymbol{w}}$，使得$L(\hat{\boldsymbol{w}})$最小

迭代法（梯度下降法）寻找参数：

1. 初始给定一个$\hat{\boldsymbol{w}}$，如$\mathbf{0}$向量或随机向量
2. 沿着梯度下降的方向进行迭代，使更新后的$L(\hat{\boldsymbol{w}})$变小：

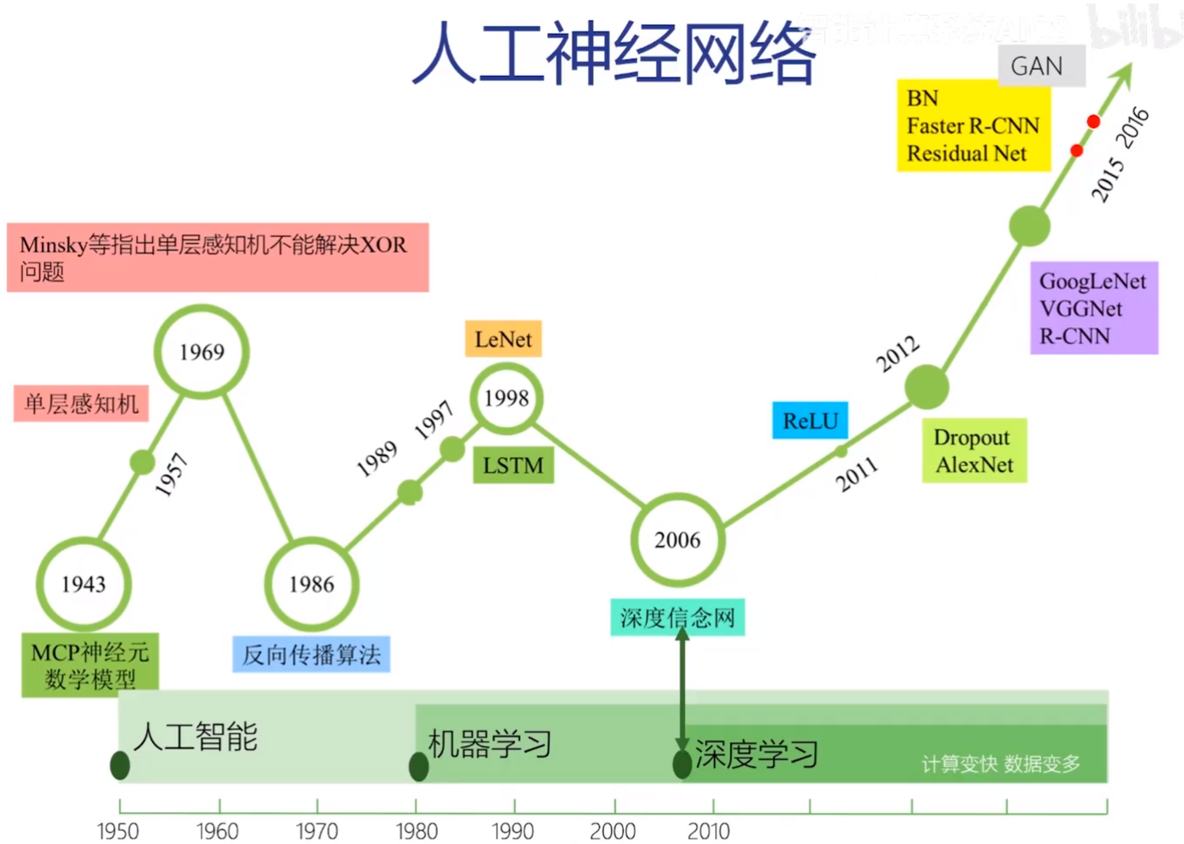
$$\hat{\boldsymbol{w}} = \hat{\boldsymbol{w}} - \alpha \frac{\partial L(\hat{\boldsymbol{w}})}{\partial \hat{\boldsymbol{w}}}$$

α为学习率或步长，迭代至找到使得$L(\hat{\boldsymbol{w}})$最小的值$\hat{\boldsymbol{w}}$停止，从而得到回归模型参数。



2.2 从机器学习到神经网络II

人工神经网络发展历程

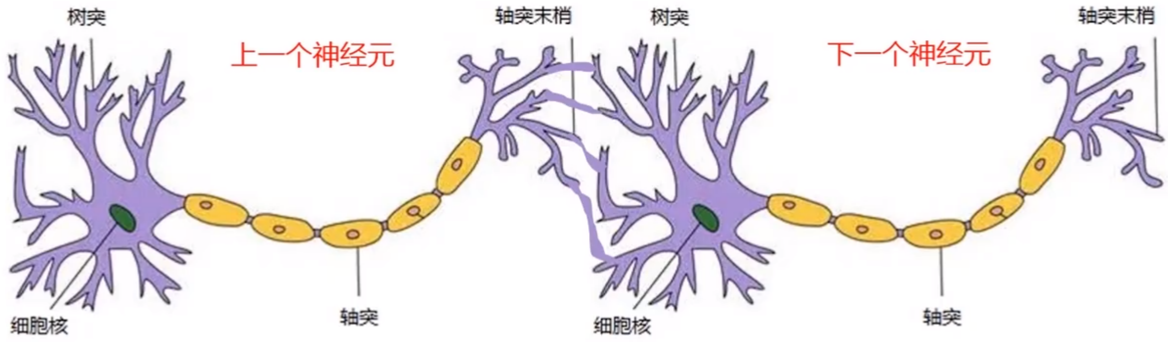


神经元模型

生物神经元

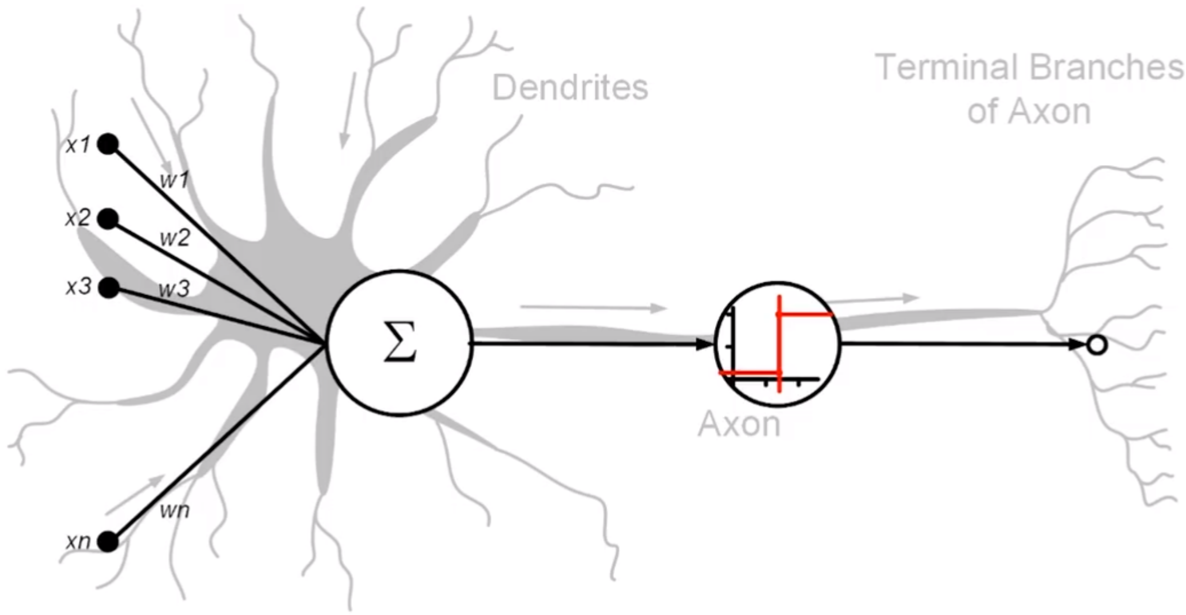
生物学领域：

1. 一个生物神经元有多个树突（接受传入信息）
2. 有一条轴突，轴突尾端有许多轴突末梢（给其他多个神经元传递信息）
3. 轴突末梢和其他生物神经元的树突产生连接的位置为突触



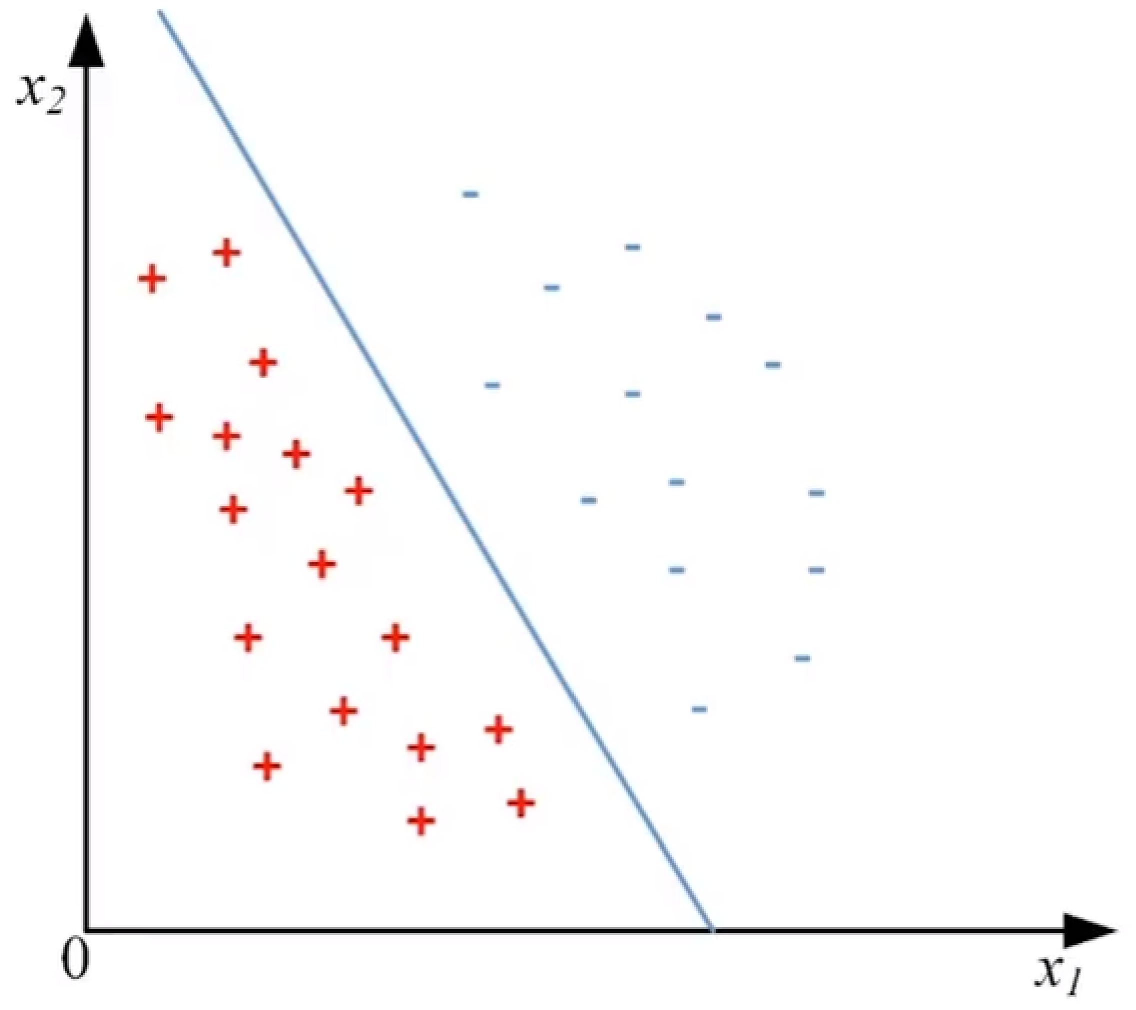
人工神经元

机器学习领域，人工神经元是一个包含输入、输出与计算功能的模型。



感知机(Perception)模型

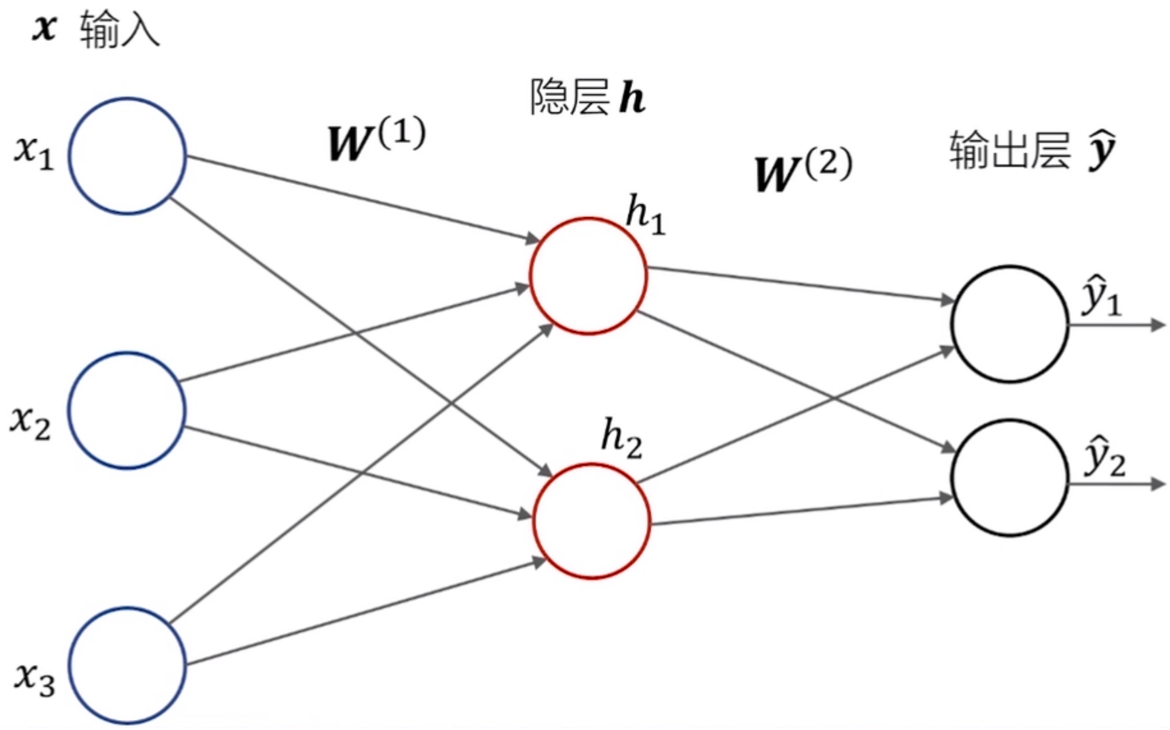
$H(\boldsymbol{x}) = sign(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x} + b)$对应一个超平面$\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x} + b = 0$，模型参数为：$(\boldsymbol{w}, b)$。感知机的目标是找到一个$(\boldsymbol{w}, b)$，将线性可分的数据集$T$中的所有样本正确分为两类。



2.3 神经网络训练的基本原理

多层感知机

- 将大量的神经元模型进行组合，用不同的方法进行连接并作用在不同的激活函数上，则构成了人工神经网络模型
- 多层感知机一般指全连接的两层神经网络模型



偏置节点

在神经网络中，除了输出层之外，都会有一偏置单元$\boldsymbol{b}$，与后一层所有节点相连。$\boldsymbol{W}$称为权重，$\boldsymbol{b}$为权重，合称神经网络的参数。

浅层神经网络特点

1. 需要数据量小、训练快；
2. 其局限性在于对复杂函数的表示能力有限，针对复杂分类问题其泛化能力受制约；
3. 为什么不更深？Kurt Hornik证明了理论上两层神经网络足以拟合任意函数，过去也没有足够的数据和计算能力；

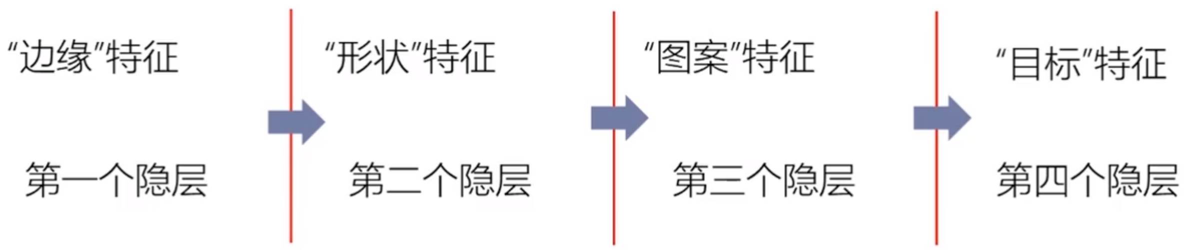
深度神经网络的成功

一些外在因素：

- 算法，优化算法层出不穷
- 数据量不断增大
- 处理器计算能力不断提升

多层神经网络

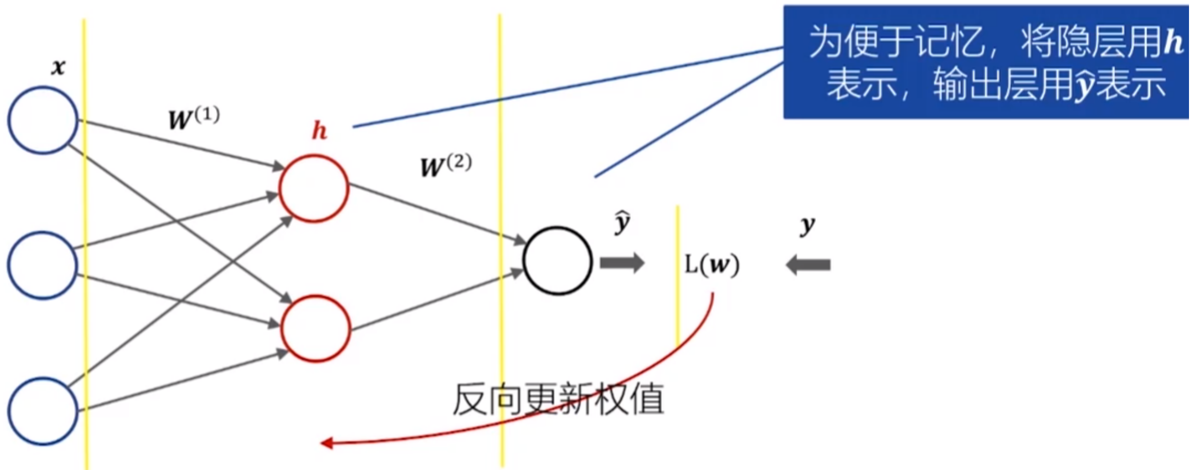
- 随着层数不断增加，每层对于迁移层次的抽象表示更为深入，每层神经元学习到的是前一层神经元更抽象的表示；
- 通过抽取更抽象的特征来对事物进行区分，从而获得更好的区分与分类能力；



神经网络的模型训练

目的：使得参数尽可能地与真实的模型逼近

- 正向传播（推断）：根据输入，经过权重、激活函数计算出隐层，将输入的特征向量从低级特征逐步提取为抽象特征，直到得到最终输出结果的过程；



- 反向传播
  - 根据正向传播的输出结果和期望值计算出的损失函数，再通过链式求导，最终从网络后端逐步修改权重，使得输出和期望值的差距变到最小的过程；
  - 将NN的输出误差反向传播到输入端，以此更新NN中各个连接的权重；
  - 当第一次反向传播完成后，NN的模型参数得到更新，网络进行下一轮正向传播。如此反复迭代进行训练，从而不断缩小误差；

2.4 神经网络的设计原则

改进：

- 调整网络拓扑结构
- 选择合适的激活函数
- 选择合适的损失函数

神经网络的拓扑调节

NN的一般结构：输入x隐层x输出层

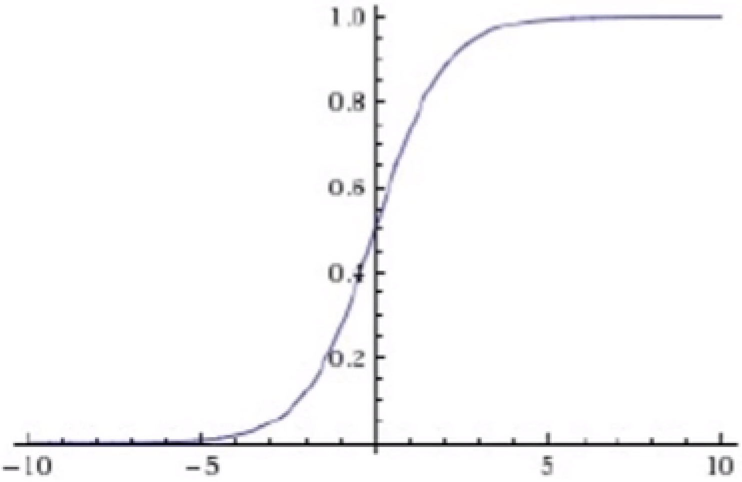
- 输入：神经元个数=特征维度
- 输出：神经元个数=分类类别数
- 隐层：隐层的数量？神经元的个数？
- 隐层的设计：
  - 作用：提取输入特征的隐藏规律，每个节点都赋予一定权重；
  - 节点太少，NN从样本中获取信息的能力越差，无法反应数据集规律；
  - 节点过多，NN拟合能力太强，可能拟合数据集中的噪声部分，导致泛化能力变差；

选择合适的激活函数

- 在神经元中，输入的数据通过加权求和后，还被作用了一个函数G，这就是激活函数(Activation Function)。
- 激活函数给神经元引入非线性因素，使得NN可逼近任何非线性函数，因此NN可应用到众多的非线性模型中
- 激活函数需具备的性质：
    1. 可微性：当优化方法是基于梯度时；
    2. 输出值的范围：当激活函数输出值是有限时，基于梯度的优化方法更稳定，因为特征的表示受有限权值的影响更显著；当激活函数输出值是无限时，模型训练更加高效；

Sigmoid函数

$$\sigma(x)=\frac{1}{1+e^{-x}}$$

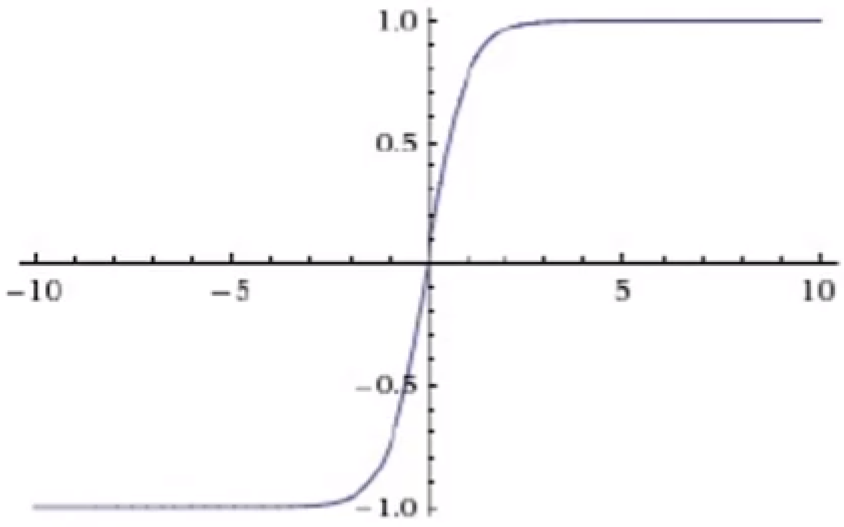


- 非0均值的输出，导致w计算的梯度始终为正
- 计算机进行指数运算速度慢
- 饱和性问题、梯度消失

tanh函数

$$\tanh(x)=\frac{\sinh(x)}{\cosh(x)}=\frac{e^x-e^{-x}}{e^x+e^{-x}}$$

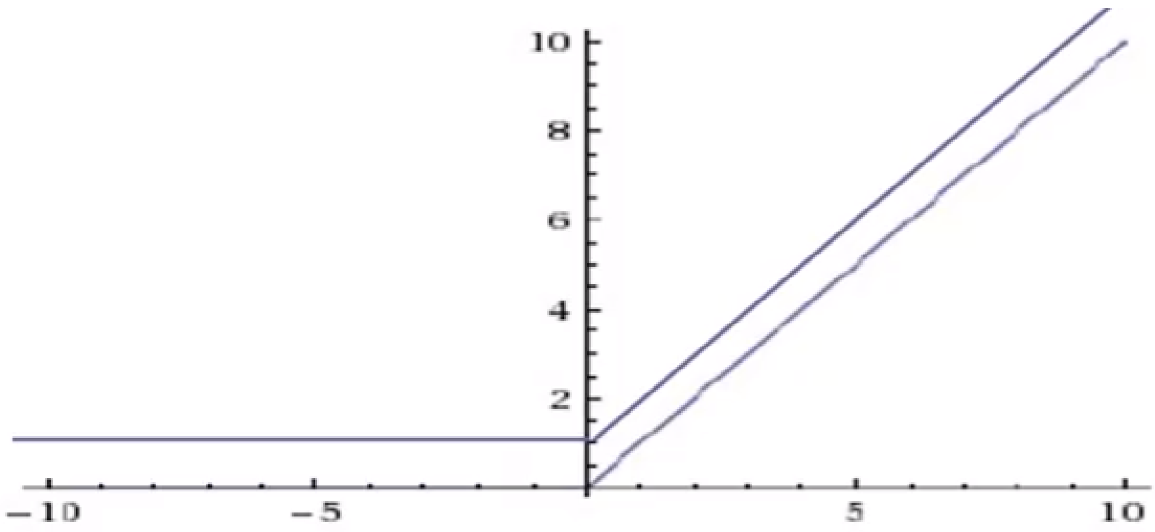
$$\tanh(x)=2sigmoid(2x)-1$$



- 与Sigmoid相比，$\tanh$是0均值的；
- 在输入很大/小时，输出几乎平滑，梯度很小，不利于权重更新；

ReLU函数

$f(x) = \max(0, x)$

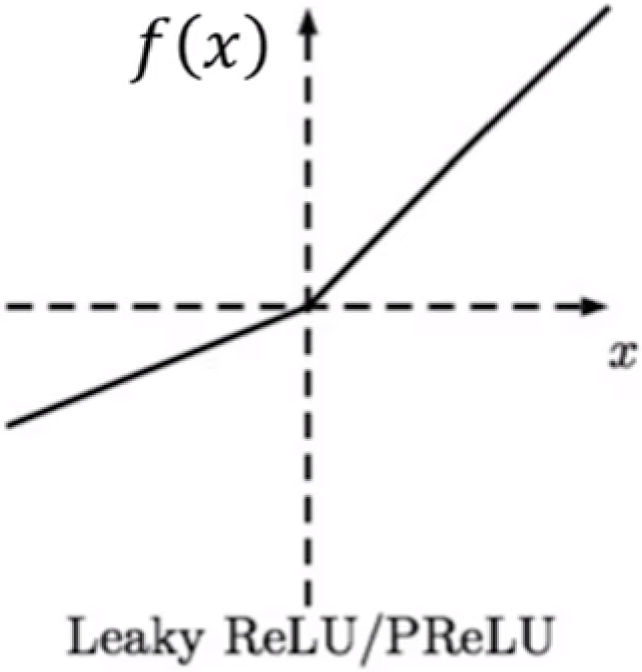


- ReLU能在$x > 0$时保持梯度不衰减，从而缓解梯度消失问题；
- ReLU死掉。若学习率很大，反向传播后的参数可能为负，导致下一轮正向传播输入为负数。当输入为负数，ReLU是完全不被激活的，这表明一旦输入到了负数，ReLU会死掉；
- 输出范围是无限的；

PReLU/Leaky ReLU函数

ReLU在$x < 0$时完全不被激活→改进Leaky ReLU

$f(x) = \max(\alpha x, x), \quad \alpha \in (0, 1)$

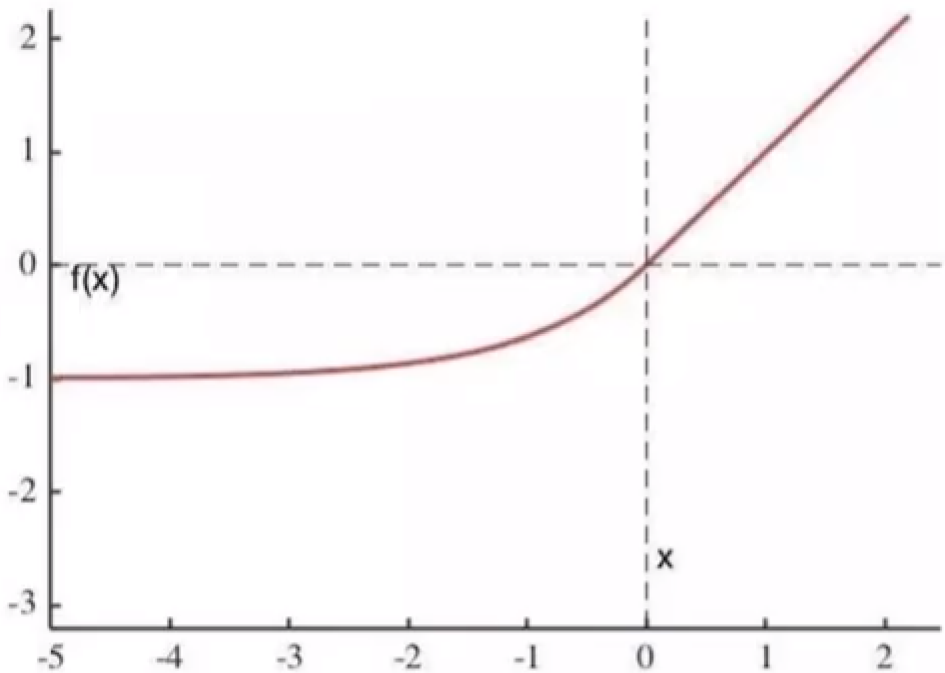


- 负数区域内，Leaky ReLU有很小斜率，避免死掉；
- PReLU定义类似，α为可调参数，每个通道有一个α，反向传播训练得到；

EReLU(Exponential)

融合Sigmoid与ReLU：

$$f(x)=\begin{cases} x & ,x>0 \\ \alpha(e^x-1) & ,x\le 0 \end{cases}$$



- α是可调参数，控制ELU在负值区间的饱和位置；
- ELU的输出均值接近0，收敛速度快；
- 右侧线性部分使得ELU能缓解梯度消失，左侧软饱和能对输入变化或噪声更鲁棒，避免神经元死掉；

常用损失函数

均方差

$$L=\frac{1}{2}(y-\hat{y})^2$$

若使用Sigmoid作为激活函数，则$\hat{y}=\sigma(z)$，其中$z=wx+b$，

$$\frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{w}}=(y-\hat{y})\sigma'(z)x$$

$$\frac{\partial L}{\partial b}=(y-\hat{y})\sigma'(z)$$

$$\sigma'(z)=(1-\sigma(z))\cdot\sigma(z)$$

⚠️ 出现问题：所求的$\frac{\partial L}{\partial w}$与$\frac{\partial L}{\partial b}$均有$\sigma'(z)$，当神经元输出接近1时，梯度趋近于0，出现梯度消失，导致NN反向传播参数更新缓慢，学习效率下降。

交叉熵

交叉熵+Sigmoid激活函数解决输出层神经元学习率缓慢问题。

$$L=-\frac{1}{m}\sum_{\boldsymbol{x}\in D}\sum_{i}y_i\ln(\hat{y}_i)$$

m为训练样本总数，i为分类类别。二分类为例：

$$L=-\frac{1}{m}\sum_{\boldsymbol{x}\in D}(y\ln(\hat{y})+(1-y)\ln(1-\hat{y}))$$

再使用Sigmoid激活函数时：$\hat{y}=\sigma(z)=\frac{1}{1+e^{-z}}=\frac{1}{1+e^{-(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}+b)}}$

根据$\sigma'(z)=(1-\sigma(z))\cdot\sigma(z)$，可推导：

$$\frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{w}}=-\frac{1}{m}\sum_{x\in D}(\sigma(z)-y)\cdot\boldsymbol{x}$$

$$\frac{\partial L}{\partial b}=-\frac{1}{m}\sum_{\boldsymbol{x}\in D}(\sigma(z)-y)$$

最后一层的梯度不含$\sigma'(z)$。

补充：**Softmax**损失函数的反向传播

设$X=[x_1,x_2,\cdots,x_n]$，$Y=softmax(X)=[y_1,y_2,\cdots,y_n]$，则有：

$$\hat{y}_i=\frac{e^{x_i}}{\sum_{j=1}^{n}e^{x_j}}$$

交叉熵：$L=-\sum_{i=1}^{n}y_i\ln\hat{y}_i$

1. 当$i=j$时，

$$\frac{\partial\hat{y}_i}{\partial x_j}=\frac{\partial\hat{y}_i}{\partial x_i}$$

$$= \frac{\partial}{\partial x_i} \cdot \frac{e^{x_i}}{\sum_k e^{x_k}}$$

$$= \frac{(\partial e^{x_i}/\partial x_i)(\sum_k e^{x_k}) - e^{x_i}(\partial \sum_k e^{x_k}/\partial x_i)}{(\sum_k e^{x_k})^2}$$

$$= \frac{e^{x_i}(\sum_k e^{x_k})}{(\sum_k e^{x_k})^2} - \frac{e^{x_i} \cdot e^{x_i}}{(\sum_k e^{x_k})^2}$$

$$= \frac{e^{x_i}}{\sum_k e^{x_k}} - \left(\frac{e^{x_i}}{\sum_k e^{x_k}}\right)^2$$

$$= \hat{y}_i - \hat{y}_i^2$$

$$= \hat{y}_i(1 - \hat{y}_i)$$

2. 当$i \neq j$时，

$$\frac{\partial \hat{y}_i}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \cdot \frac{e^{x_i}}{\sum_k e^{x_k}}$$

$$= \frac{(\partial e^{x_i}/\partial x_j)(\sum_k e^{x_k}) - e^{x_i}(\partial \sum_k e^{x_k}/\partial x_j)}{(\sum_k e^{x_k})^2}$$

$$= \frac{0 \cdot (\sum_k e^{x_k}) - e^{x_i} \cdot e^{x_j}}{(\sum_k e^{x_k})^2}$$

$$= \frac{-e^{x_i} \cdot e^{x_j}}{(\sum_k e^{x_k})^2}$$

$$= -\frac{e^{x_i}}{\sum_k e^{x_k}} \cdot \frac{e^{x_j}}{\sum_k e^{x_k}}$$

$$= -\hat{y}_i \hat{y}_j$$

$$\because \frac{\partial L}{\partial \hat{y}_i} = -\frac{y_i}{\hat{y}_i}$$

$$\therefore \frac{\partial L}{\partial x_i} = \sum_{j=1}^{n} \frac{\partial L}{\partial \hat{y}_j} \cdot \frac{\partial \hat{y}_j}{\partial x_i}$$

$$= -\sum_{j=1}^{n} \frac{y_j}{\hat{y}_j} \cdot \frac{\partial \hat{y}_j}{\partial x_i}$$

$$= -\frac{y_i}{\hat{y}_i} \cdot \frac{\partial \hat{y}_i}{\partial x_i} - \sum_{j=1, j \neq i}^{n} \frac{y_j}{y_j} \cdot \frac{\partial \hat{y}_j}{\partial x_i}$$

$$= -\frac{y_i}{\hat{y}_i} \cdot \hat{y}_i(1 - \hat{y}_i) - \sum_{j=1, j \neq i}^{n} (-y_j \hat{y}_i)$$

$$= -y_i + y_i \hat{y}_i + \sum_{j=1, j \neq i}^{n} y_j \hat{y}_i$$

$$= -y_i + \sum_{j=1}^{n} y_j \hat{y}_i$$

$$= -y_i + \hat{y}_i \sum_{j=1}^{n} y_j$$

$\because \sum_{j=1}^{n} y_j = 1$

$= \hat{y}_i - y_i$

损失函数特性

- 同一算法损失函数不唯一
- 是参数w, b的函数
- 损失函数可评价模型好坏
- 是一个标量
- 挑选对(w, b)可微的函数
- 又称代价函数、目标函数

2.5 过拟合与正则化

泛化

定义：机器学习不仅要求在训练集上求得较小误差，在测试集上也要表现好。

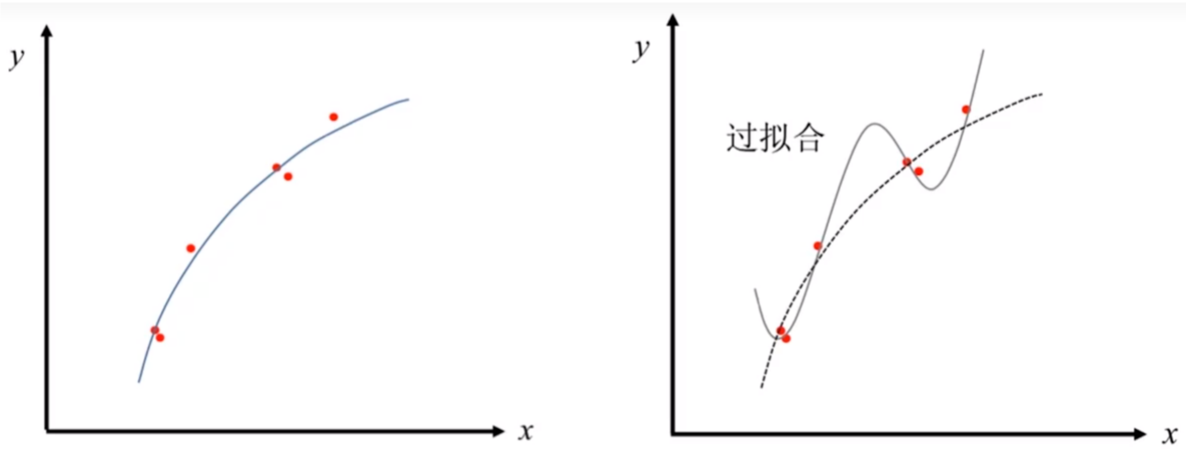
- 欠拟合：训练的特征少，误差大；
- 过拟合：特征维度多，拟合函数完美接近训练集，泛化能力差，对新数据预测能力差；

参数范数惩罚、稀疏化、**Bagging**继承、**Dropout**、提前终止、数据集扩增等正则化方法可有效抑制过拟合。

正则化

拟合函数：$w_0 + w_1 x + w_2 x^2$
过拟合：$w_0 + w_1 x + w_2 x^2 + w_3 x^3 + w_4 x^4$

加惩罚项，使得w_3、w_4足够小



目标函数：$L(\boldsymbol{w}) = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^{m} \| \boldsymbol{y}_i - \hat{\boldsymbol{y}}_i \|^2$

$\min_{\boldsymbol{w}} \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^{m} \| \boldsymbol{y}_i - \hat{\boldsymbol{y}}_i \|^2 + C_1 \cdot w_3^2 + C_2 \cdot w_4^2$

C_1、C_2取常数且很大，例如，1000

正则化项为：$\theta \sum_{j=1}^{k} w_j^2$，$\theta$为正则化参数，正则化工程仅对权重$w$进行惩罚，正则化项记为：$\Omega(\boldsymbol{w})$

正则化后的损失函数记为：$\widetilde{L}(\boldsymbol{w}; \boldsymbol{X}, \boldsymbol{y}) = \boldsymbol{L}(\boldsymbol{w}; \boldsymbol{X}, \boldsymbol{y}) + \theta\Omega(\boldsymbol{w})$

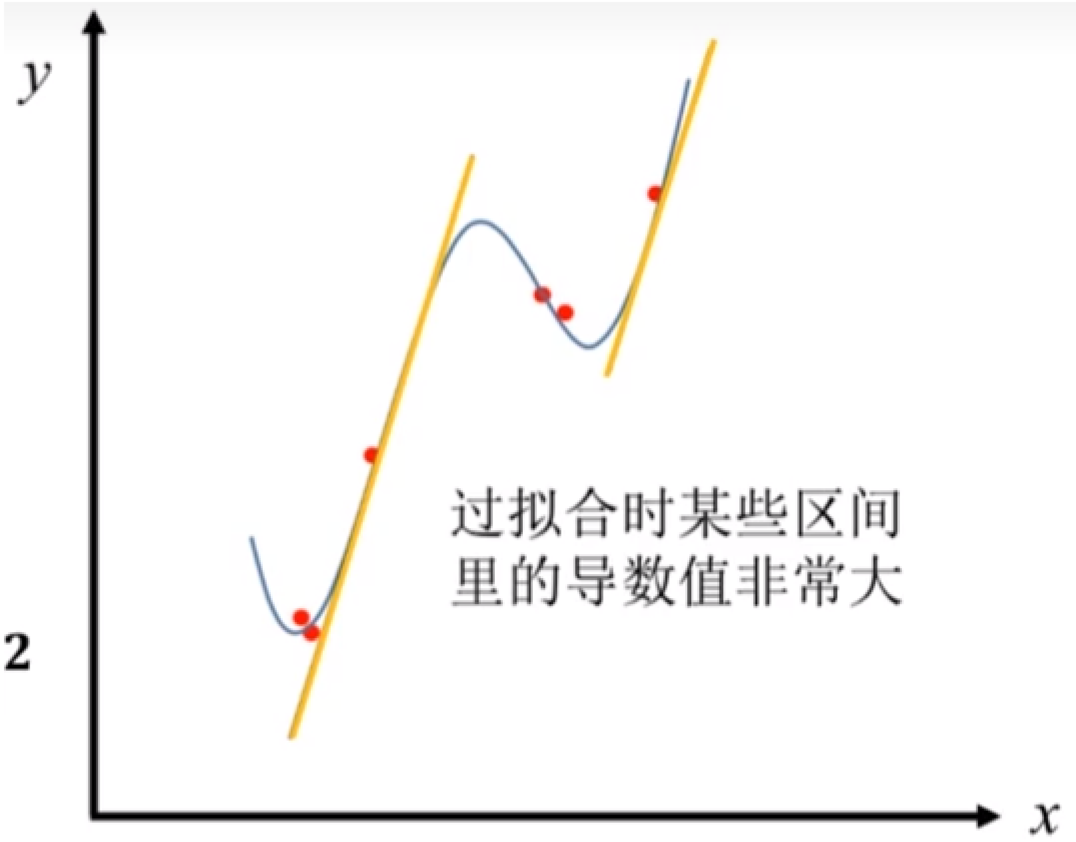
L^2正则化

L^2正则化项：$\Omega(\boldsymbol{w}) = \frac{1}{2} \parallel w \parallel_2^2$

目标函数：$\widetilde{L}(\boldsymbol{w}; \boldsymbol{X}, \boldsymbol{y}) = L(\boldsymbol{w}; \boldsymbol{X}, \boldsymbol{y}) + \frac{\theta}{2} \parallel \boldsymbol{w} \parallel_2^2$

$\nabla_{\boldsymbol{w}} \widetilde{L}(\boldsymbol{w}; \boldsymbol{X}, \boldsymbol{y}) = \nabla_{\boldsymbol{w}} L(\boldsymbol{w}; \boldsymbol{X}, \boldsymbol{y}) + \theta \boldsymbol{w}$

L^2正则化如何避免过拟合：过拟合时某些区间的导数值非常大，通过L^2正则化，w权重变小，网络复杂度降低，对数据拟合更好。



L^1正则化

L^1正则化项是各个参数绝对值之和：$\Omega(\boldsymbol{w}) = \parallel \boldsymbol{w} \parallel_1 = \sum_i |w_i|$

目标函数：$\widetilde{L}(\boldsymbol{w}; \boldsymbol{X}, \boldsymbol{y}) = L(\boldsymbol{w}; \boldsymbol{X}, \boldsymbol{y}) + \theta \parallel \boldsymbol{w} \parallel_1$

$\nabla_{\boldsymbol{w}} \widetilde{L}(\boldsymbol{w}; \boldsymbol{X}, \boldsymbol{y}) = \nabla_{\boldsymbol{w}} L(\boldsymbol{w}; \boldsymbol{X}, \boldsymbol{y}) + \theta sign(\boldsymbol{w})$

L^1正则化通过加入符号函数，使得当w_i为正时，更新后的w_i变小，当w_i为负时，更新后的w_i变大，因此让w_i接近0。如此，网络中的权重接近0，从而减小网络复杂度，防止过拟合。

Bagging集成方法

- 训练不同的模型共同决策，不同的模型即使在一数据集上也会产生不同误差；
- 可多次重复使用同一模型，训练算法和目标函数进行训练；
- 数据集从原始数据中重复采样获取，大小与原始数据集保持一致；
- 模型平均是减小泛化误差的一种可靠方法；

Dropout正则化

L^2、L^1正则化通过在目标函数中增加惩罚项实现，Dropout正则化通过在训练时暂时修改NN来实现，随机删除一些隐层单元，在计算时无视其连接。

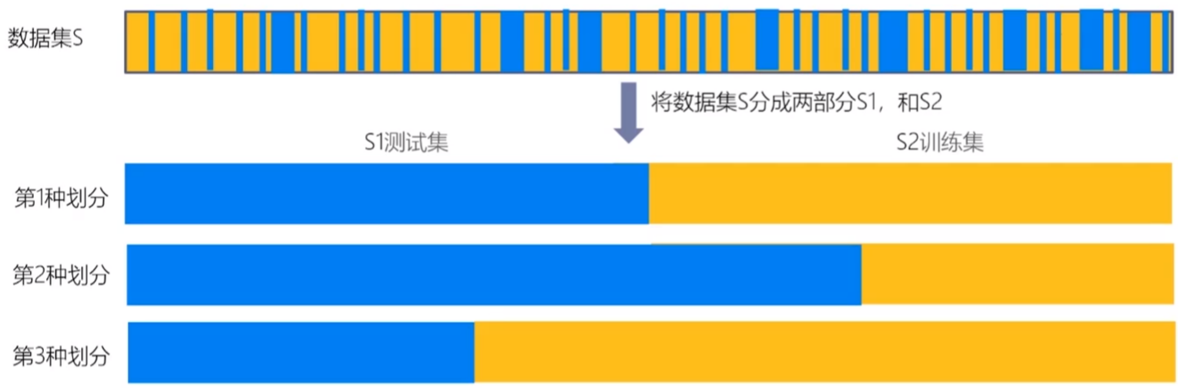
其他正则化方法

提前终止、多任务学习、数据集增强、参数共享、稀疏表示……

2.6 交叉验证

- 给每个样本作为测试集和训练集的机会，充分利用样本信息，保证了鲁棒性，防止过拟合；
- 选择多种模型进行训练时，使用交叉验证能评判各模型的鲁棒性；

最简单的验证方式



缺点：不同划分方式下，得到的MSE变动较大。最终模型与参数的选取极大程度依赖训练集和测试集的划分方法，只有部分数据参与了模型训练。

Leave-one-out交叉验证

每次取出一个数据作为测试集的唯一元素，而其他$n-1$数据作为训练集。最终训练出n个模型，得到n个MSE，取平均。

缺点：计算量过大，耗时

K折交叉验证

不重复地每次取一份做测试集，其余$K-1$份做训练集，之后计算在测试集上的MSE_i，最终取平均：

$$MSE = \frac{1}{K}\sum_{i=1}^{K} MSE_i$$

优点：所有样本都被作为测试集和训练集，每个样本都被验证一次。比LOO交叉验证，计算成本和耗时均降低。