

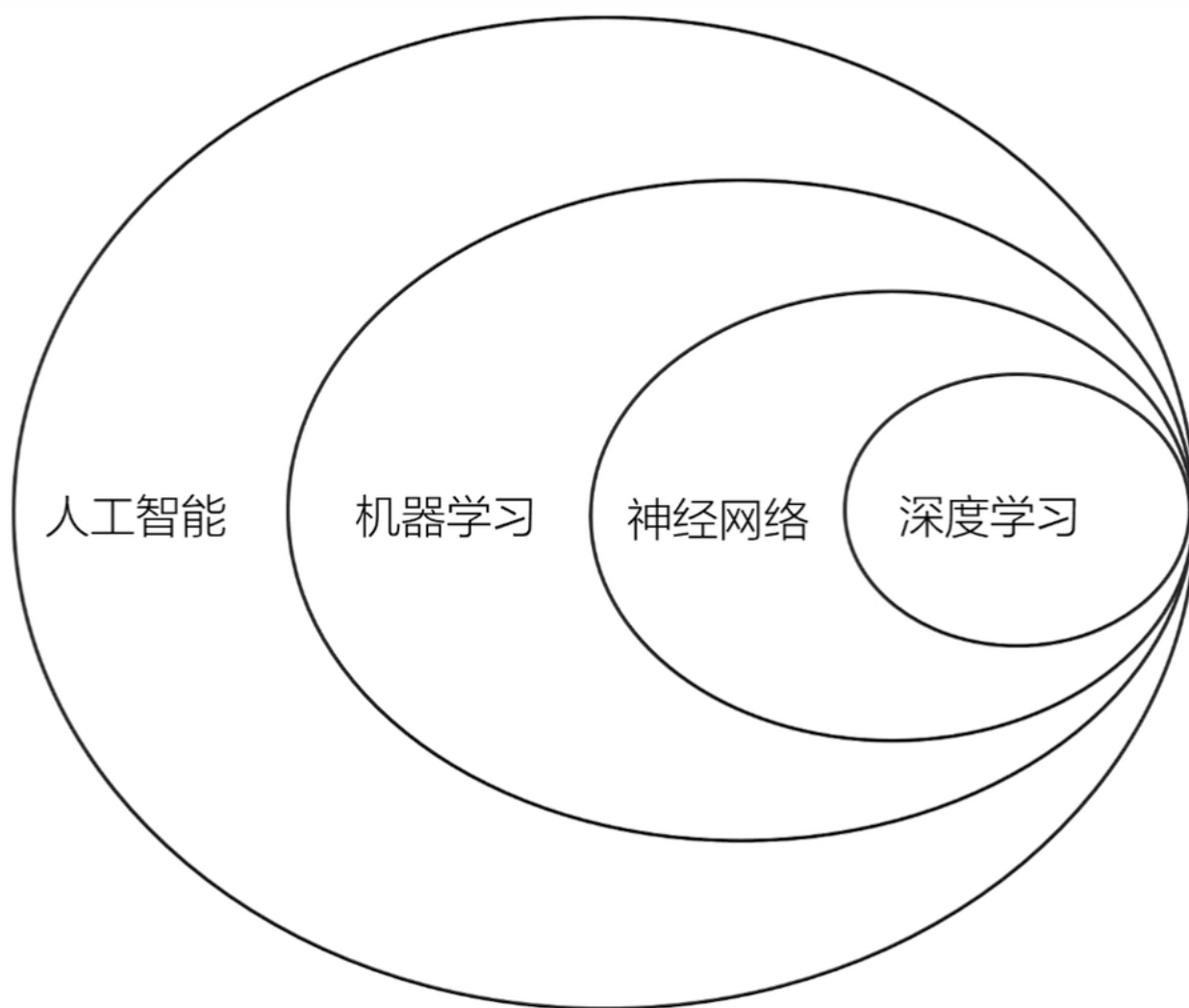
Chapter 2 神经网络基础

Revision : 4

2.1 从机器学习到神经网络I

包含关系

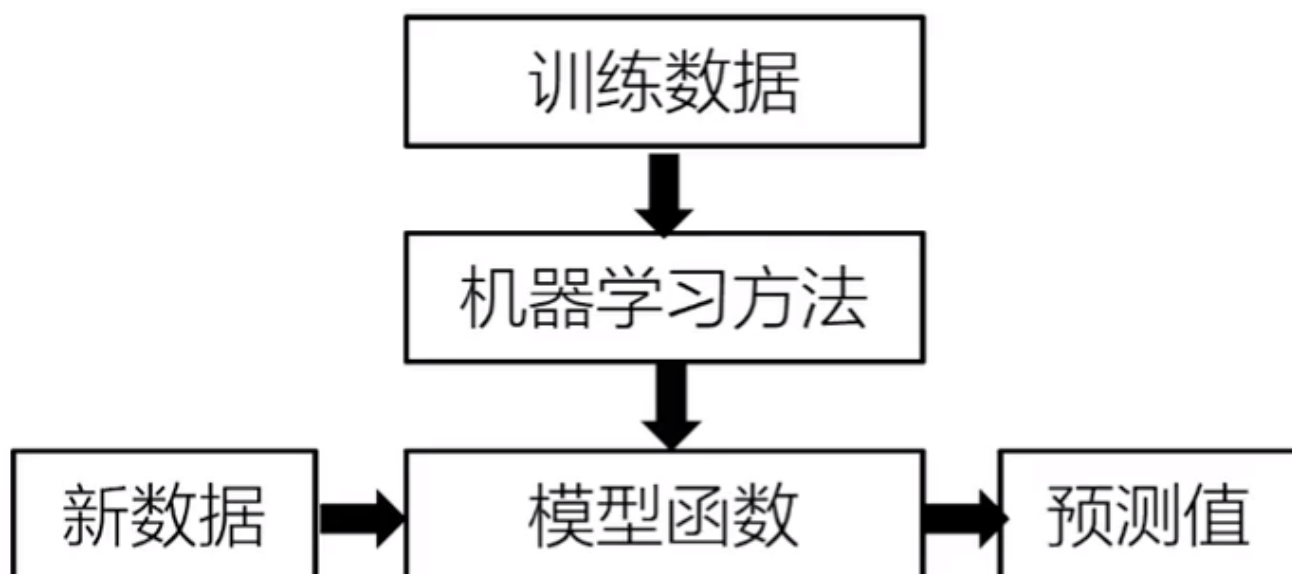
人工智能→机器学习→神经网络→深度学习



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， \mathbf{a} 、 \mathbf{b} 、 \mathbf{c}
9. 矩阵：黑斜体大写字母， \mathbf{A} 、 \mathbf{B} 、 \mathbf{C}

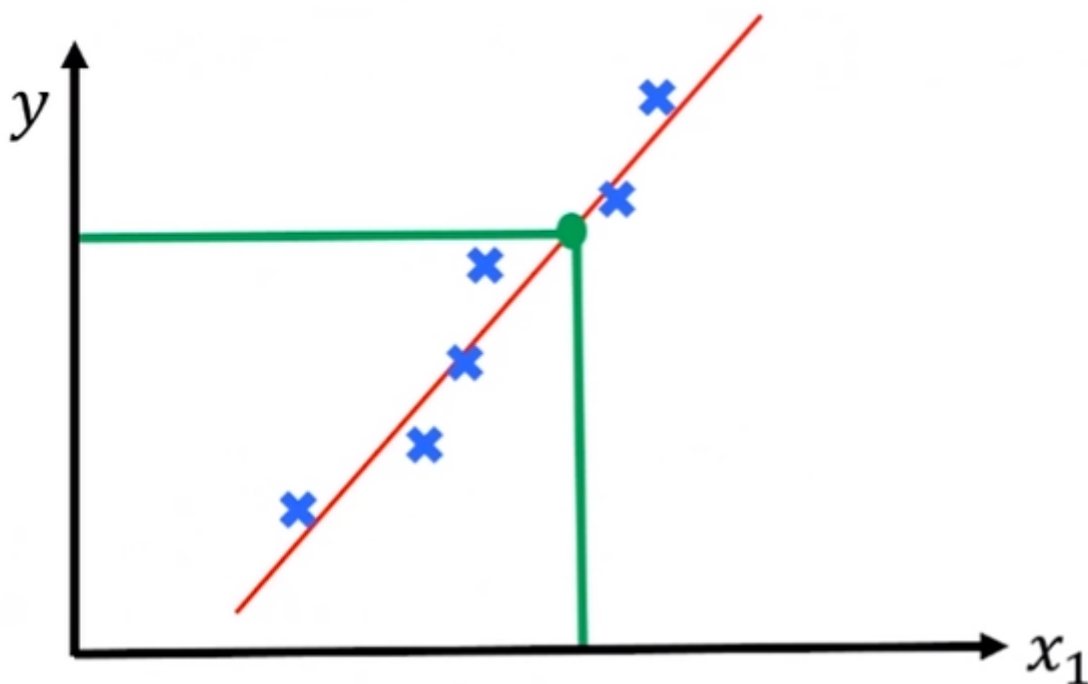
线性回归

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：

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

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：

$$\varepsilon = y - \hat{y} = y - \hat{\mathbf{w}}^T \mathbf{x}$$

ε 满足 $N(0, \sigma^2)$ 高斯分布 → **最大似然估计** → 损失函数：

$$L(\hat{\mathbf{w}}) = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^m (\hat{\mathbf{w}}^T \mathbf{x} - y_j)^2$$

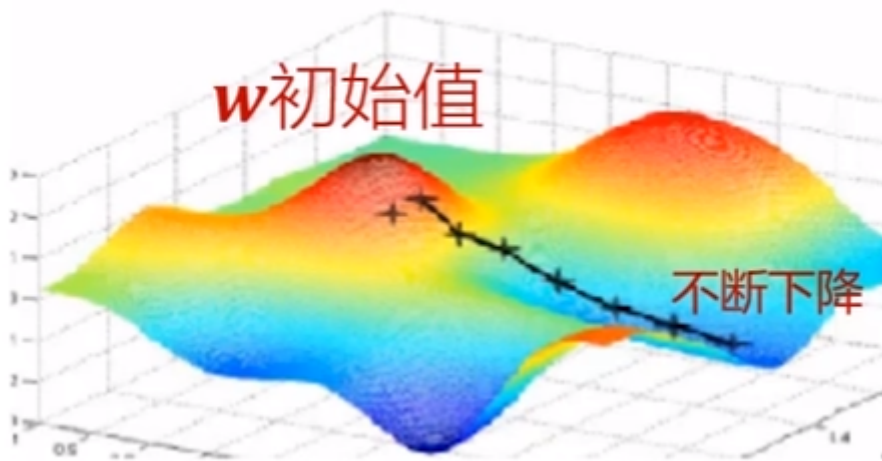
寻找参数 $\hat{\mathbf{w}}$ ，使得 $L(\hat{\mathbf{w}})$ 最小

迭代法（梯度下降法）寻找参数：

1. 初始给定一个 $\hat{\mathbf{w}}$ ，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 $L(\hat{\mathbf{w}})$ 变小：

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

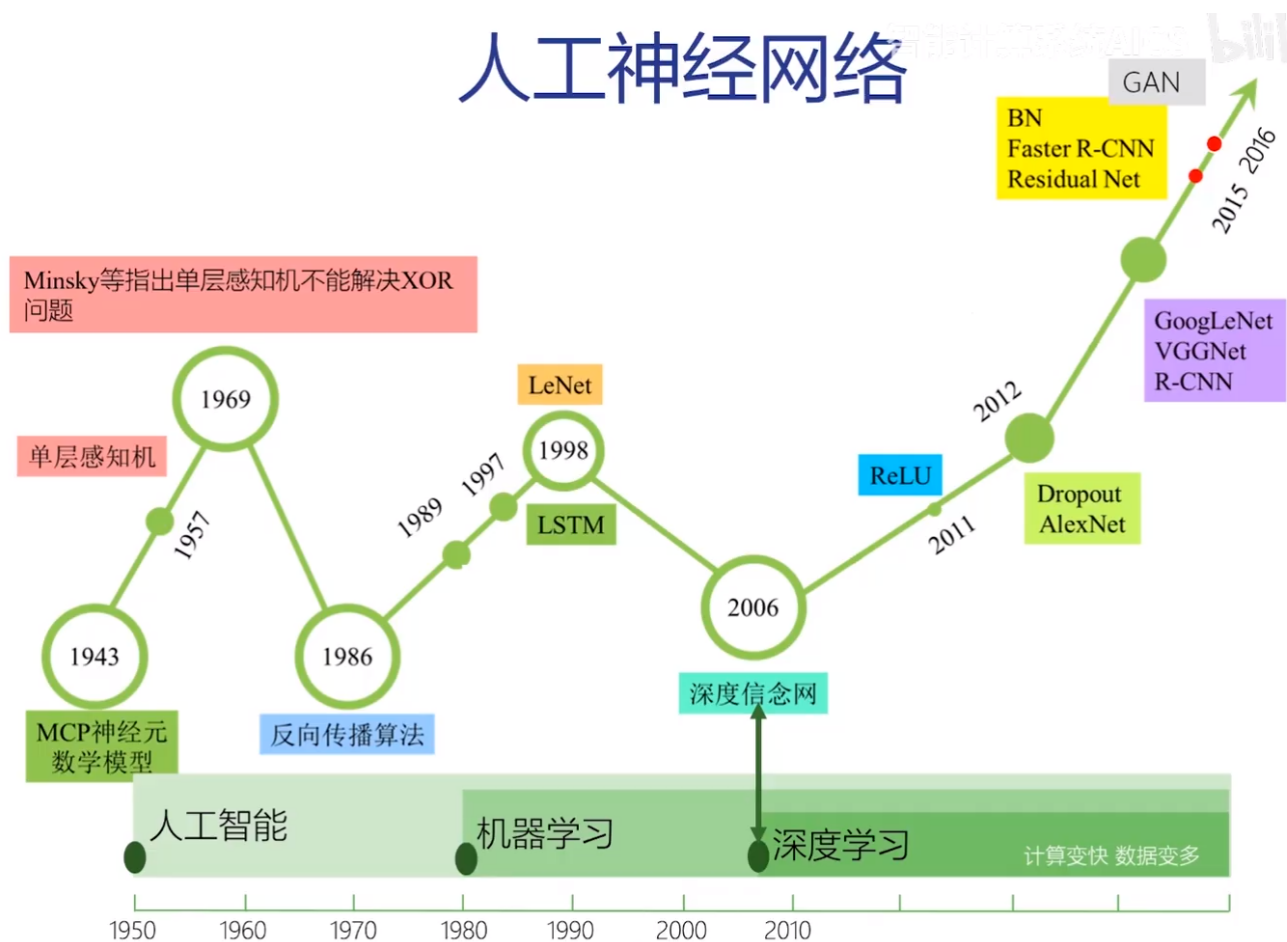
α 为学习率或步长，迭代至找到使得 $L(\hat{\mathbf{w}})$ 最小的值 $\hat{\mathbf{w}}$ 停止，从而得到回归模型参数。



2.2 从机器学习到神经网络II

人工神经网络发展历程

人工神经网络



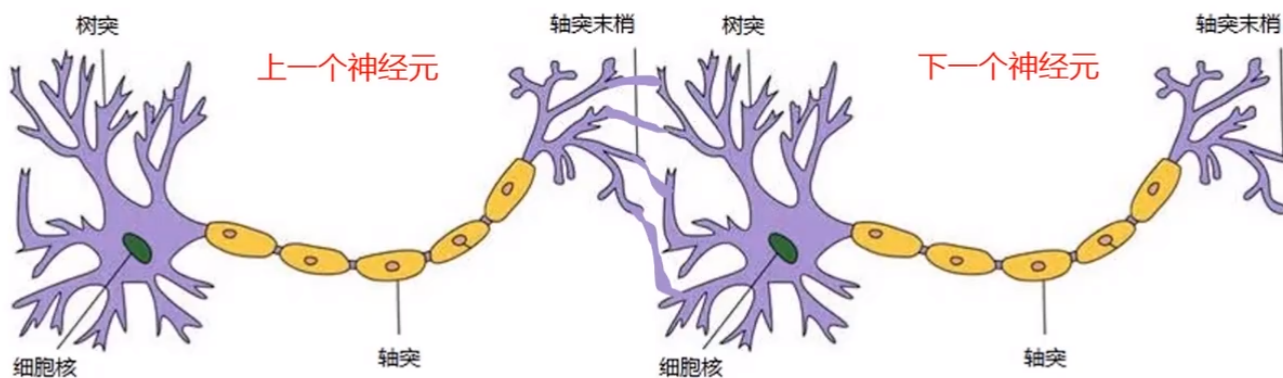
神经元模型

生物神经元

生物学领域：

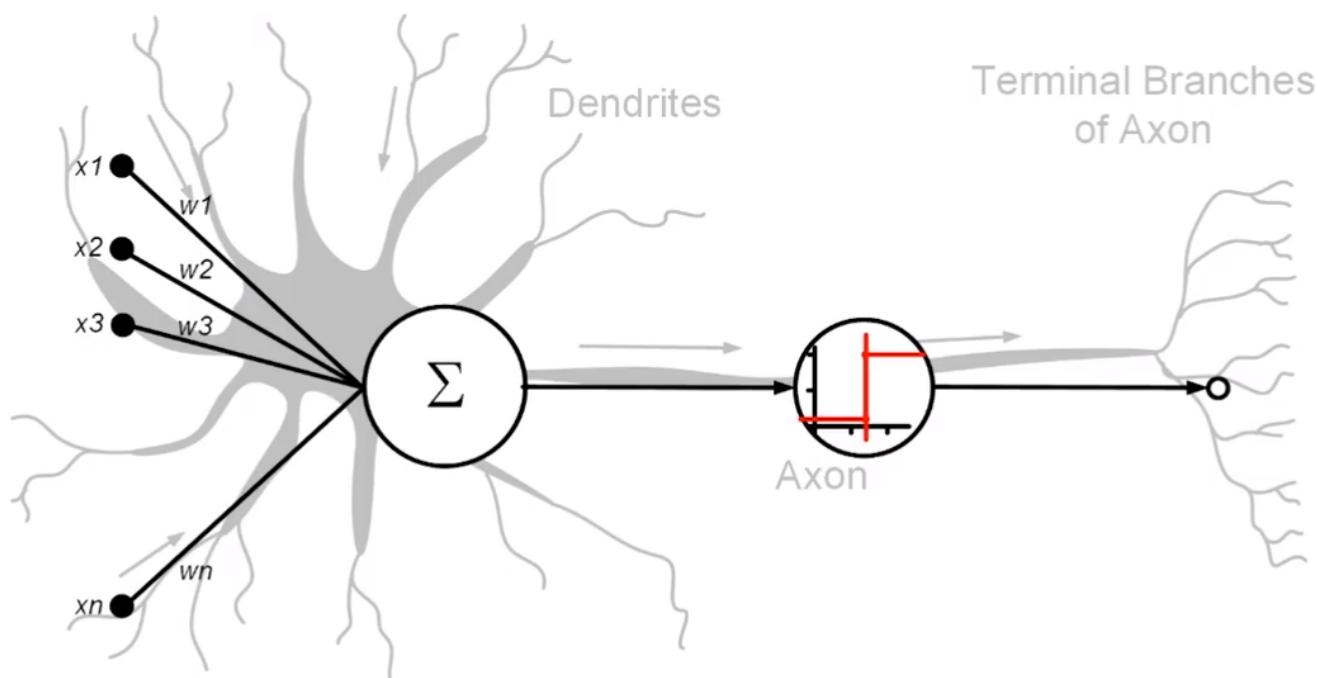
1. 一个生物神经元有多个树突（接受传入信息）；

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；



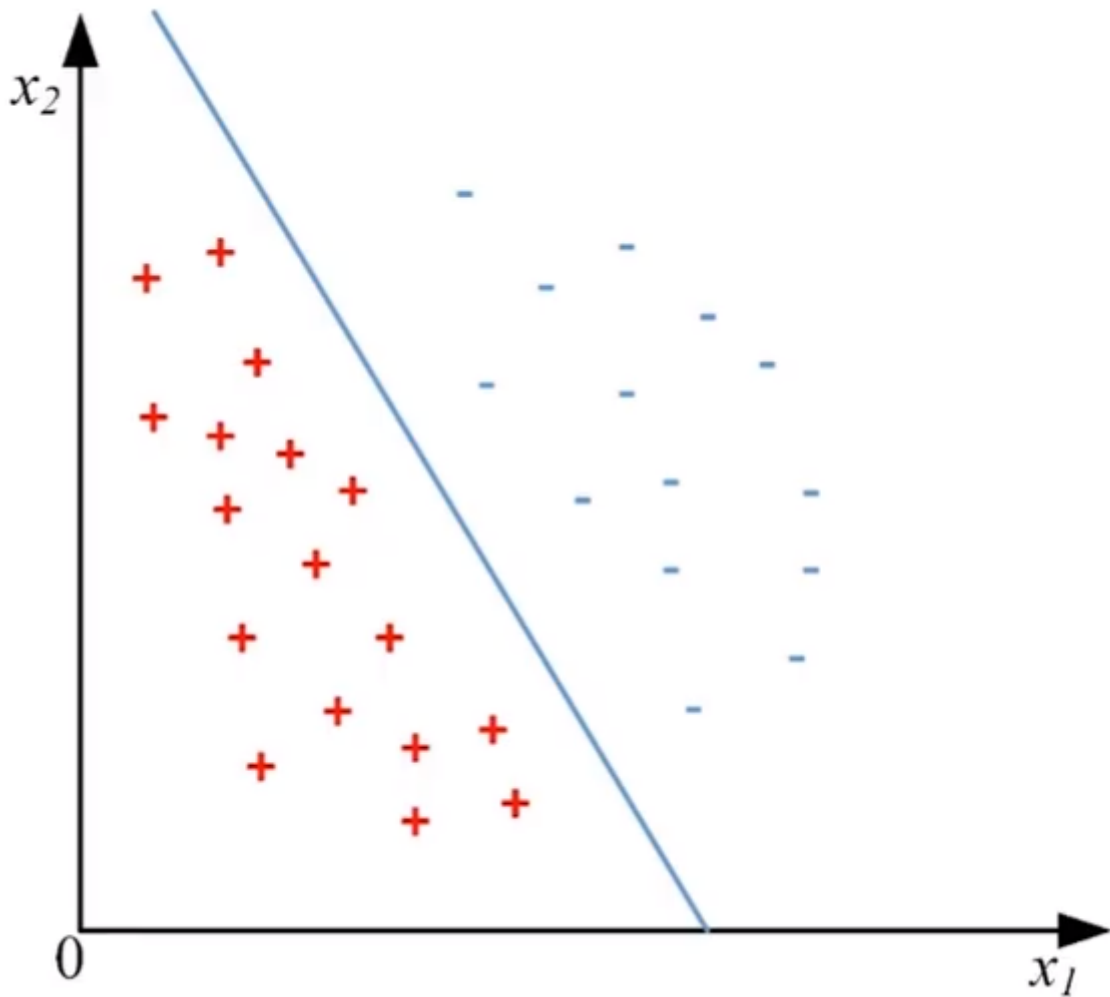
人工神经元

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

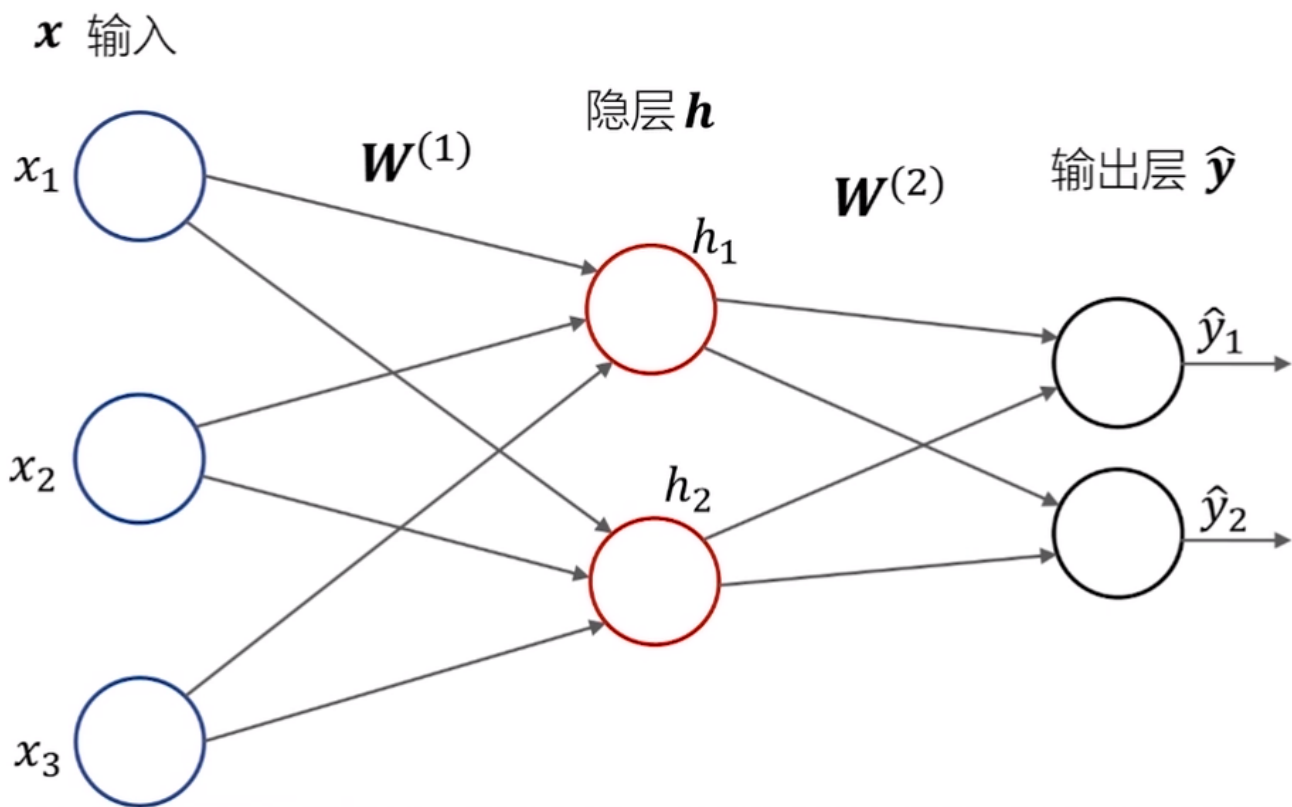
$H(\mathbf{x}) = \text{sign}(\mathbf{w}^T \mathbf{x} + b)$ 对应一个超平面 $\mathbf{w}^T \mathbf{x} + b = 0$ ，模型参数为： (\mathbf{w}, b) 。感知机的目标是找到一个 (\mathbf{w}, b) ，将线性可分的数据集 T 中的所有样本正确分为两类。



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 b ，与后一层所有节点相连。 W 称为权重， b 为偏置，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

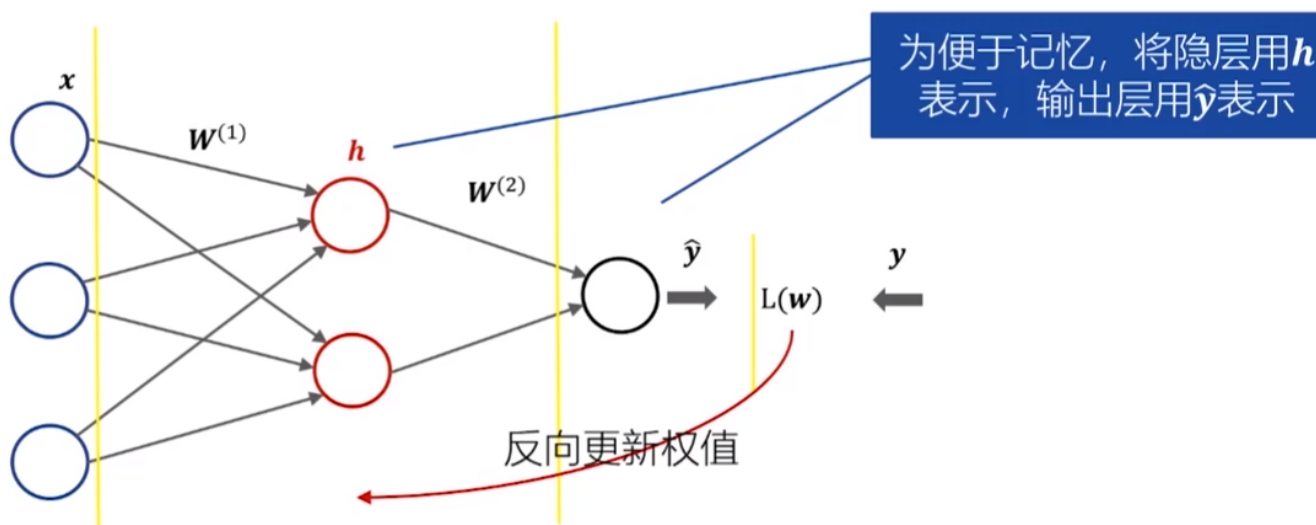
- 随着层数不断增加，每层对于迁移层次的抽象表示更为深入，每层神经元学习到的是前一层神经元更抽象的表示；
- 通过抽取更抽象的特征来对事物进行区分，从而获得更好的区分与分类能力；



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+隐层+输出层

- 输入：神经元个数=特征维度；

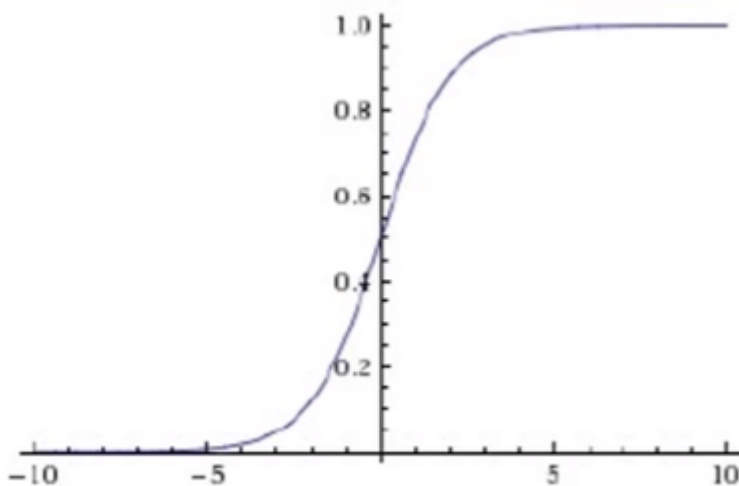
- 输出：神经元个数=分类类别数；
- 隐层：隐层的数量？神经元的个数？
- 隐层的设计：
 - 作用：提取输入特征的隐藏规律，每个节点都赋予一定权重；
 - 节点太少，NN从样本中获取信息的能力越差，无法反应数据集规律；
 - 节点过多，NN拟合能力太强，可能拟合数据集中的噪声部分，导致泛化能力变差；

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

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

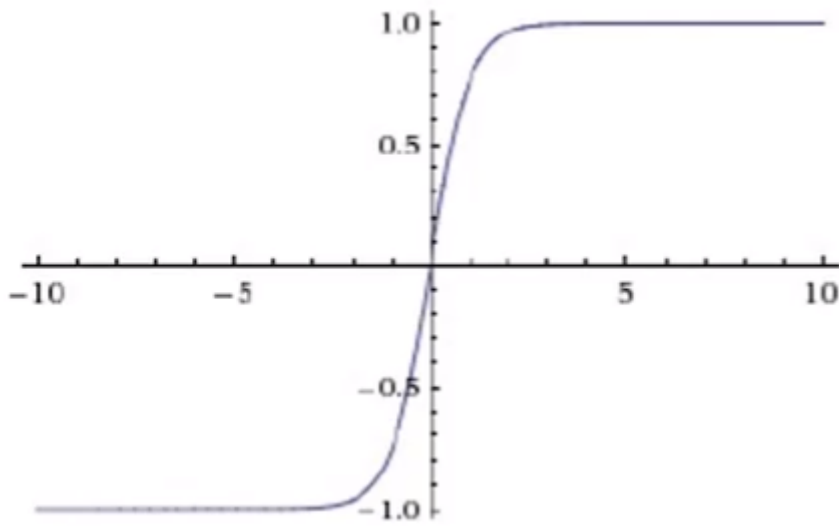


- 非0均值的输出，导致 w 计算的梯度始终为正
- 计算机进行指数运算速度慢
- 饱和性问题、梯度消失

tanh函数

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

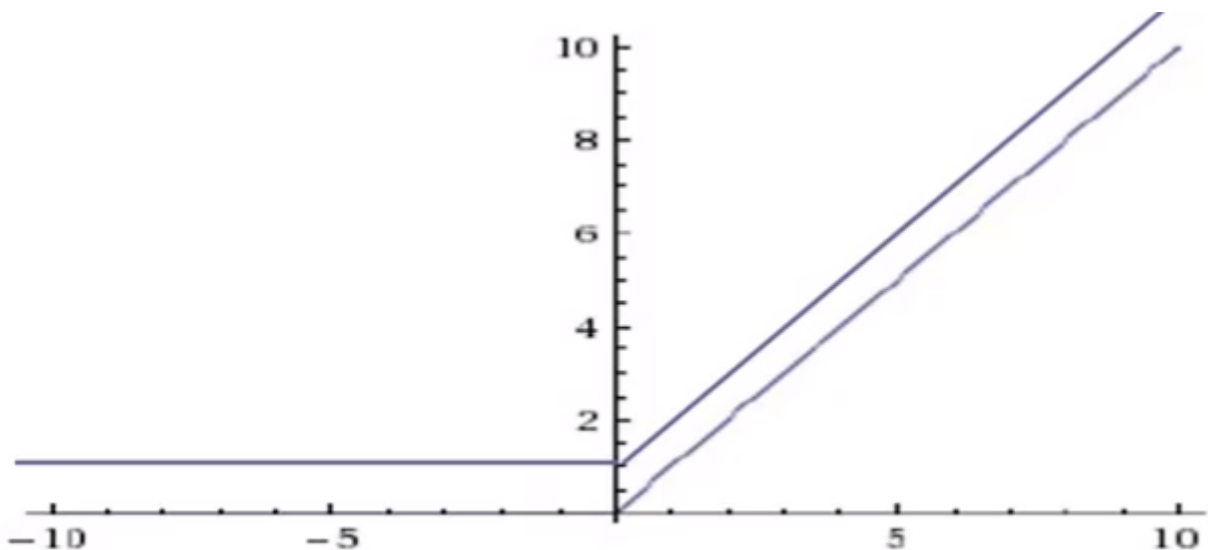
$$\tanh(x) = 2\text{sigmoid}(2x) - 1$$



- 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

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

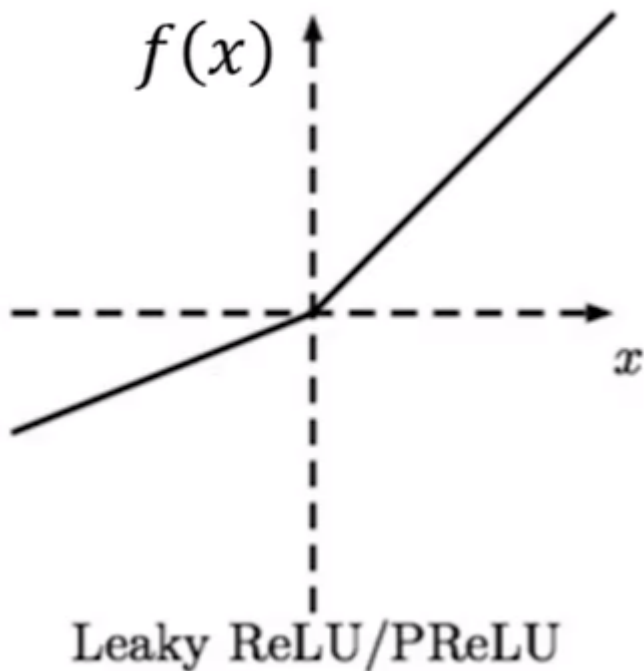


- ReLU能在 $x > 0$ 时保持梯度不衰减，从而缓解梯度消失问题；
- ReLU死掉。若学习率很大，反向传播后的参数可能为负，导致下一轮正向传播输入为负数。当输入为负数，ReLU是**完全不被激活的**，这表明一旦输入到了负数，ReLU会死掉；
- 输出范围是无限的；

PReLU/Leaky ReLU函数

ReLU在 $x < 0$ 时完全不被激活→改进Leaky ReLU

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

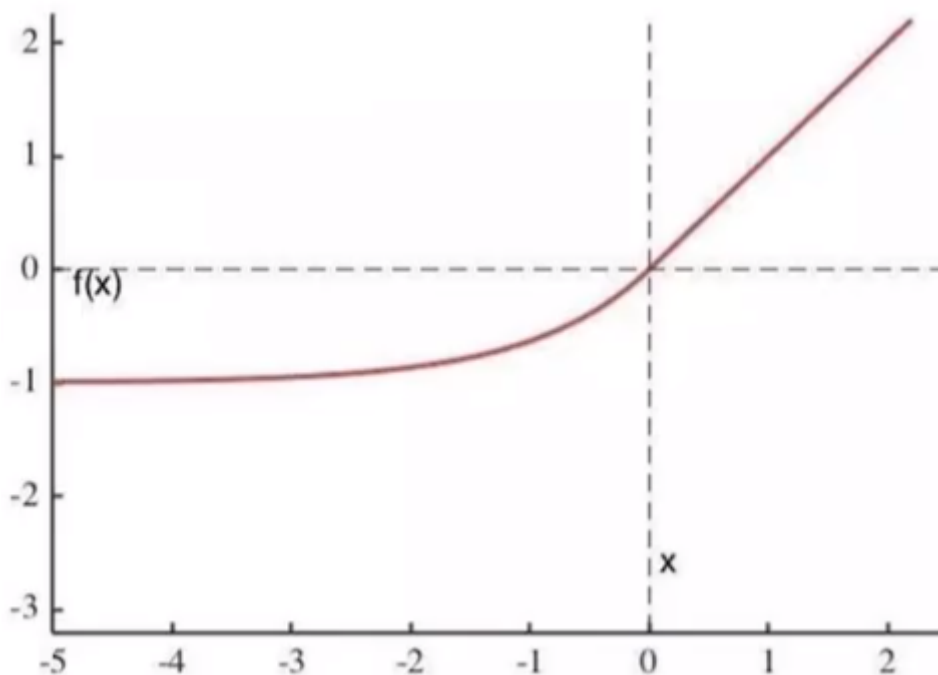


- 负数区域内，Leaky ReLU有很小斜率，避免死掉；
- PReLU定义类似， α 为可调参数，每个通道有一个 α ，反向传播训练得到；

EReLU(Exponential)

融合Sigmoid与ReLU：

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



- 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 $z = wx + b$ ，

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

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

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

▲ 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。

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

m 为训练样本总数， i 为分类类别。二分类为例：

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

再使用Sigmoid激活函数时：

$$\hat{y} = \sigma(z) = \frac{1}{1 + e^{-z}} = \frac{1}{1 + e^{-(\mathbf{w}^T \mathbf{x} + b)}}$$

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

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

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

最后一层的梯度不含 $\sigma'(z)$ 。

补充：Softmax损失函数的反向传播

设 $X = [x_1, x_2, \dots, x_n]$ ， $Y = \text{softmax}(X) = [y_1, y_2, \dots, y_n]$ ，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，

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{y}_i}{\partial x_j} &= \frac{\partial \hat{y}_i}{\partial x_i} \\ &= \frac{\partial}{\partial x_i} \cdot \frac{e^{x_i}}{\sum_k e^{x_k}} \\ &= \frac{(\partial e^{x_i} / \partial x_i)(\sum_k e^{x_k}) - e^{x_i}(\partial \sum_k e^{x_k} / \partial x_i)}{(\sum_k e^{x_k})^2} \\ &= \frac{e^{x_i}(\sum_k e^{x_k})}{(\sum_k e^{x_k})^2} - \frac{e^{x_i} \cdot e^{x_i}}{(\sum_k e^{x_k})^2} \\ &= \frac{e^{x_i}}{\sum_k e^{x_k}} - \left(\frac{e^{x_i}}{\sum_k e^{x_k}} \right)^2 \\ &= \hat{y}_i - \hat{y}_i^2 \\ &= \hat{y}_i(1 - \hat{y}_i) \end{aligned}$$

2. 当 $i \neq j$ 时，

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{y}_i}{\partial x_j} &= \frac{\partial}{\partial x_j} \cdot \frac{e^{x_i}}{\sum_k e^{x_k}} \\ &= \frac{(\partial e^{x_i} / \partial x_j)(\sum_k e^{x_k}) - e^{x_i}(\partial \sum_k e^{x_k} / \partial x_j)}{(\sum_k e^{x_k})^2} \\ &= \frac{0 \cdot (\sum_k e^{x_k}) - e^{x_i} \cdot e^{x_j}}{(\sum_k e^{x_k})^2} \\ &= \frac{-e^{x_i} \cdot e^{x_j}}{(\sum_k e^{x_k})^2} \\ &= -\frac{e^{x_i}}{\sum_k e^{x_k}} \cdot \frac{e^{x_j}}{\sum_k e^{x_k}} \\ &= -\hat{y}_i \hat{y}_j \\ &\therefore \frac{\partial L}{\partial \hat{y}_i} = -\frac{y_i}{\hat{y}_i} \\ &\therefore \frac{\partial L}{\partial x_i} = \sum_{j=1}^n \frac{\partial L}{\partial \hat{y}_j} \cdot \frac{\partial \hat{y}_j}{\partial x_i} \\ &= -\sum_{j=1}^n \frac{y_j}{\hat{y}_j} \cdot \frac{\partial \hat{y}_j}{\partial x_i} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -\frac{y_i}{\hat{y}_i} \cdot \frac{\partial \hat{y}_i}{\partial x_i} - \sum_{j=1, j \neq i}^n \frac{y_j}{y_j} \cdot \frac{\partial \hat{y}_j}{\partial x_i} \\
&= -\frac{y_i}{\hat{y}_i} \cdot \hat{y}_i(1 - \hat{y}_i) - \sum_{j=1, j \neq i}^n (-y_j \hat{y}_i) \\
&= -y_i + y_i \hat{y}_i + \sum_{j=1, j \neq i}^n y_j \hat{y}_i \\
&= -y_i + \sum_{j=1}^n y_j \hat{y}_i \\
&= -y_i + \hat{y}_i \sum_{j=1}^n y_j \\
&\quad \because \sum_{j=1}^n y_j = 1 \\
&= \hat{y}_i - y_i
\end{aligned}$$

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；

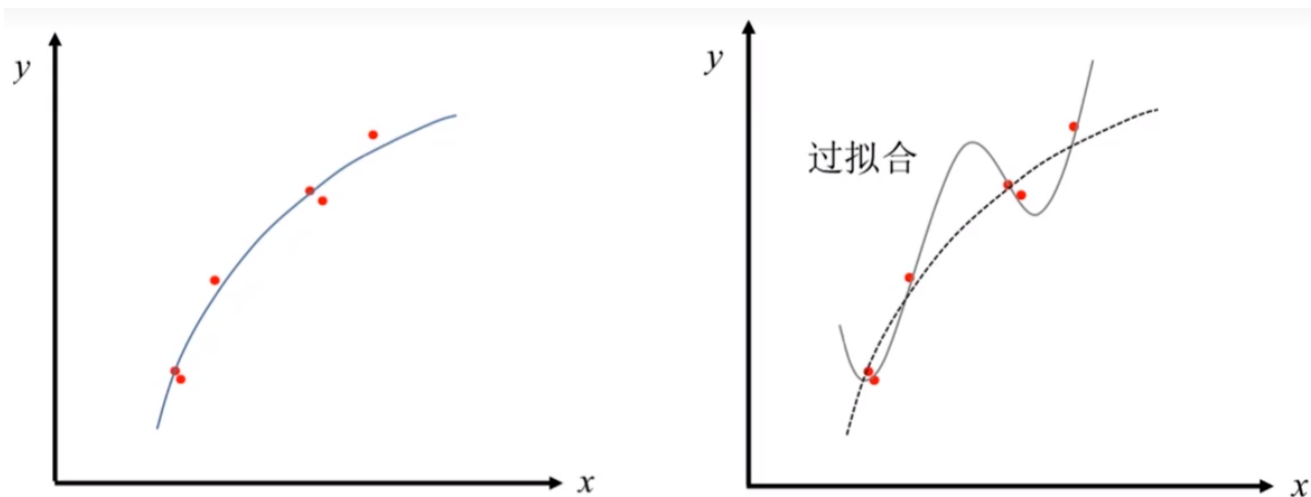
参数范数惩罚、稀疏化、Bagging继承、Dropout、提前终止、数据集扩增等正则化方法可有效抑制过拟合。

正则化

拟合函数： $w_0 + w_1x + w_2x^2$

过拟合： $w_0 + w_1x + w_2x^2 + w_3x^3 + w_4x^4$

加**惩罚项**，使得 w_3 、 w_4 足够小



目标函数：

$$L(\mathbf{w}) = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^m \|\mathbf{y}_i - \hat{\mathbf{y}}_i\|^2$$

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

C_1 、 C_2 取常数且很大，例如，1000；

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

正则化后的损失函数记为：

$$\tilde{L}(\mathbf{w}; \mathbf{X}, \mathbf{y}) = L(\mathbf{w}; \mathbf{X}, \mathbf{y}) + \theta \Omega(\mathbf{w})$$

L^2 正则化

L^2 正则化项：

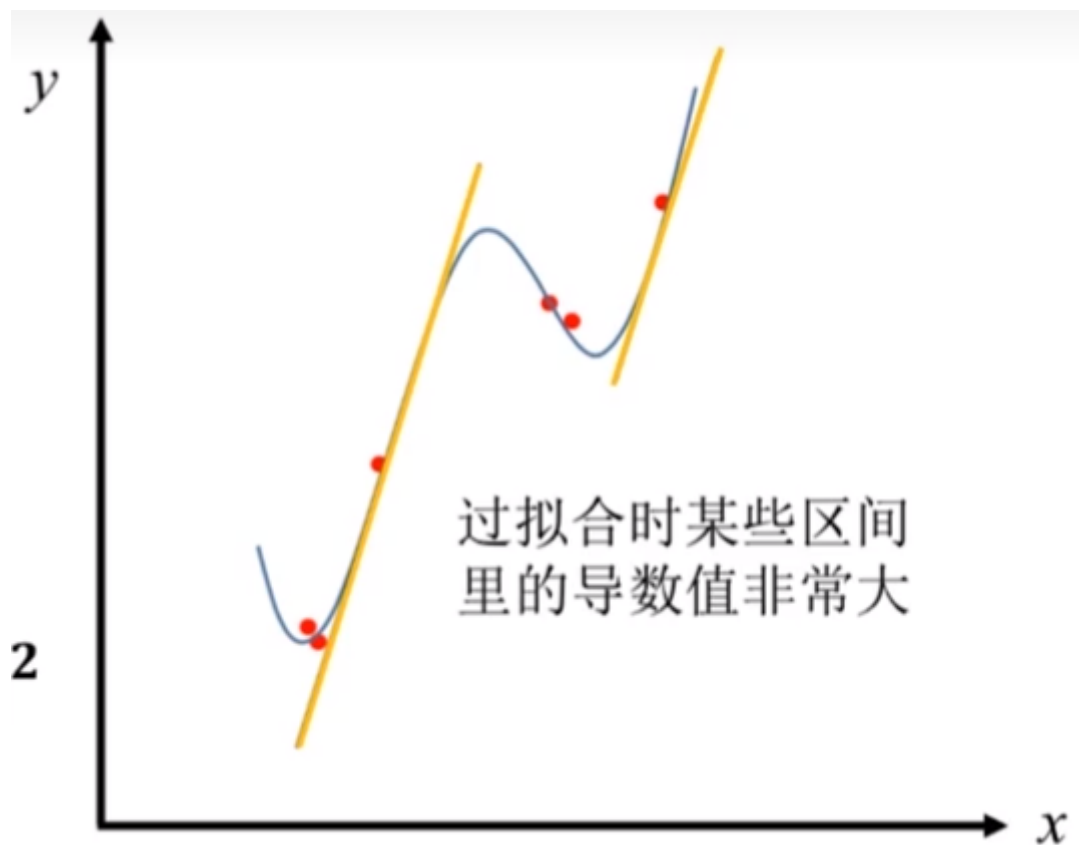
$$\Omega(\mathbf{w}) = \frac{1}{2} \|\mathbf{w}\|_2^2$$

目标函数：

$$\tilde{L}(\mathbf{w}; \mathbf{X}, \mathbf{y}) = L(\mathbf{w}; \mathbf{X}, \mathbf{y}) + \frac{\theta}{2} \|\mathbf{w}\|_2^2$$

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

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：

$$\Omega(\mathbf{w}) = \|\mathbf{w}\|_1 = \sum_i |w_i|$$

目标函数：

$$\tilde{L}(\mathbf{w}; \mathbf{X}, \mathbf{y}) = L(\mathbf{w}; \mathbf{X}, \mathbf{y}) + \theta \|\mathbf{w}\|_1$$

$$\nabla_{\mathbf{w}} \tilde{L}(\mathbf{w}; \mathbf{X}, \mathbf{y}) = \nabla_{\mathbf{w}} L(\mathbf{w}; \mathbf{X}, \mathbf{y}) + \theta \text{sign}(\mathbf{w})$$

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。

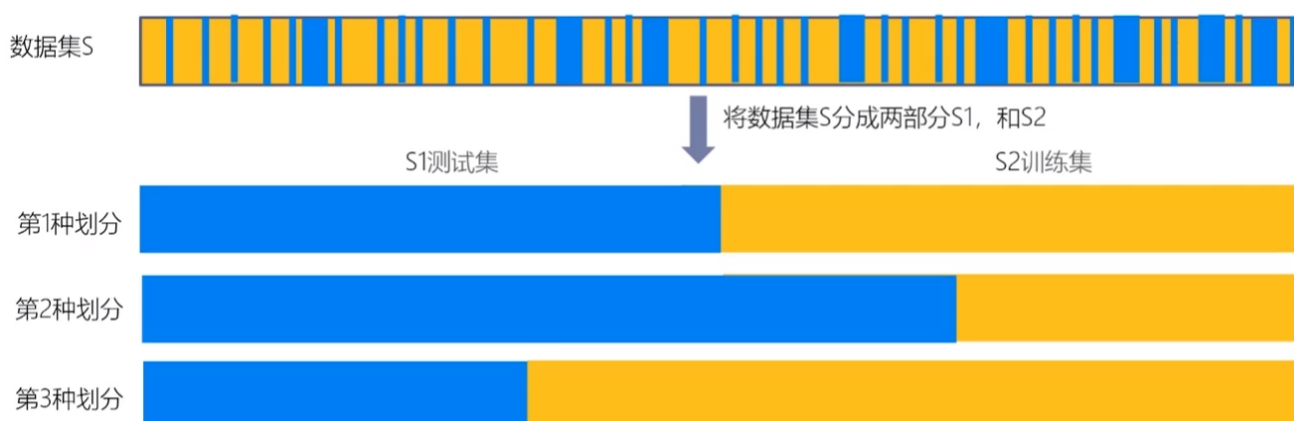
其他正则化方法

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

数据集S包
含n个数据
分成K=5份



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。