# 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

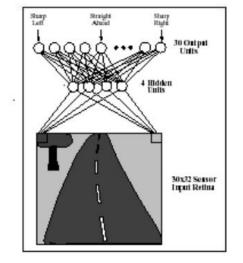
径向基网络 RBF

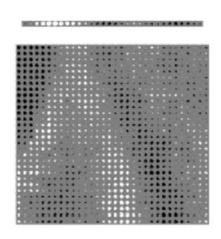
#### 回顾

☐ ALVINN: Autonomous Land Vehicle In a Neural Network



- □ 1993年, CMU研发
- □ 输入: 30\*32的像素
- □ 4个隐藏节点



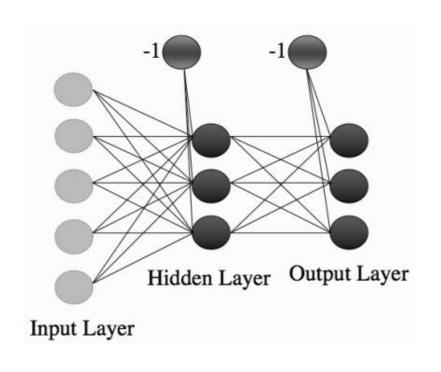


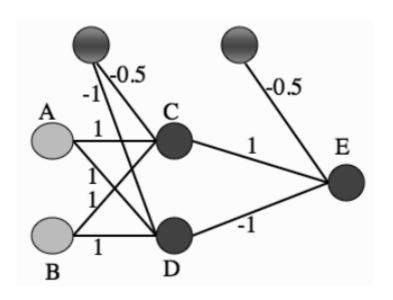
□ 输出: 30个驾驶动作(急剧左转、 急剧右转,正前方行进.....)

有向/无向?有环/无环?

结构? 多层(浅/深)?

# 回顾

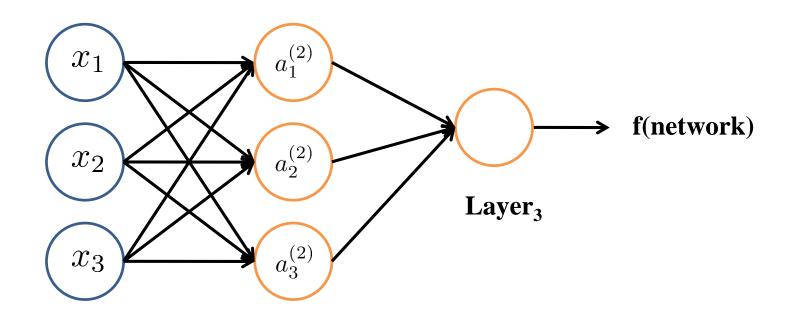




多层感知器网络

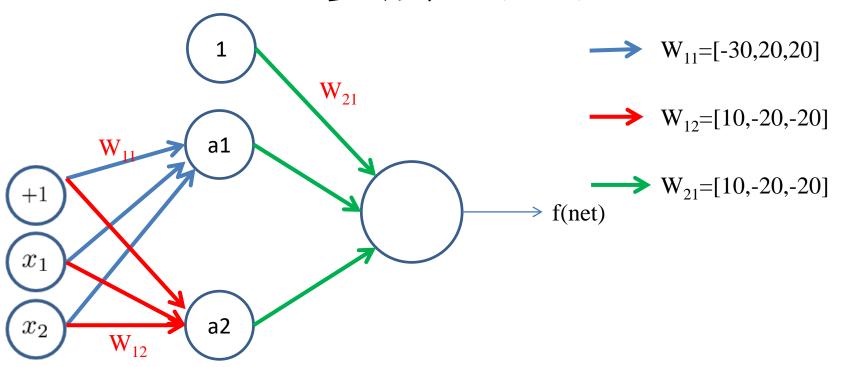
解决XOR的多层感知器网络权值

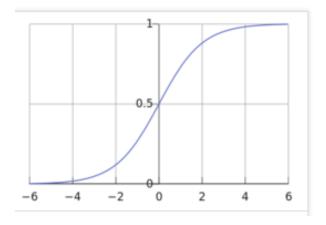
# 多层感知机



Layer<sub>1</sub> Layer<sub>2</sub> Hidden layer

### 多层感知机

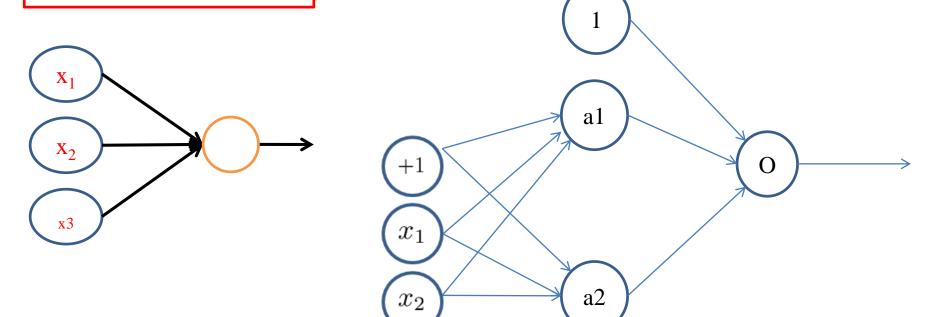




$x_1$	$x_2$	$a_1^{(2)}$	$a_2^{(2)}$	f(net)
0	0	0	1	0
0	1	0	0	1
1	0	0	0	1
1	1	1	0	0

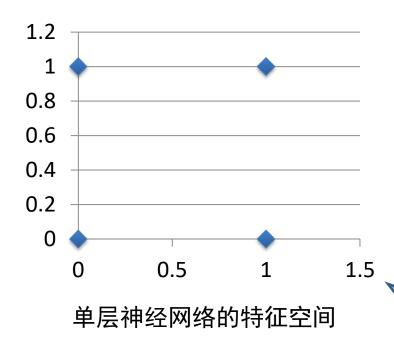
# 多层感知机的隐层

为什么要使用隐层神经元

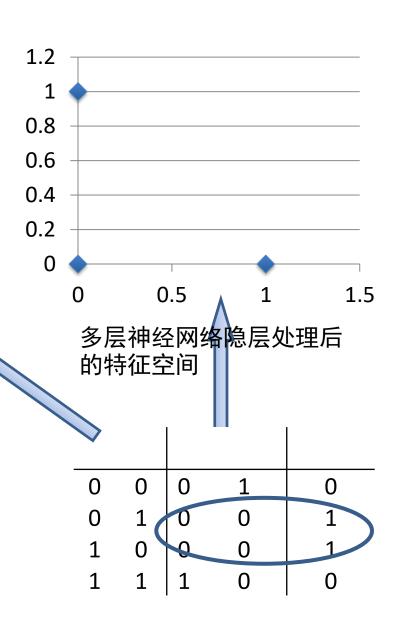


Q1:为什么需要隐藏层?

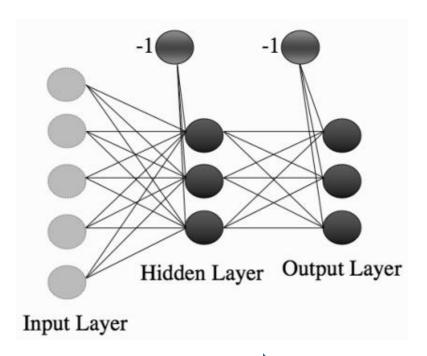
Q2:如何计算隐藏层的权值?

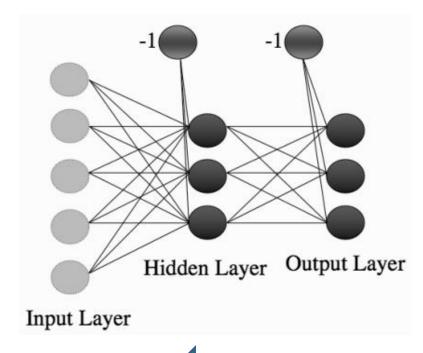


隐藏层神经元实际为特征检测算子 (feature detector), 在多层神经网络 的学习过程中, 隐藏层神经元开始 逐步 "发现"刻画训练数据的突出 特征。



### 工作机制: 向前和向后







计算误差

向后:分阶段,

向前:分阶段,

逐层调整权值

逐层计算输入和输出

### 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

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

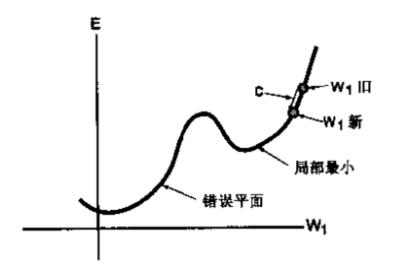
□ 多层感知机(BP神经网络)

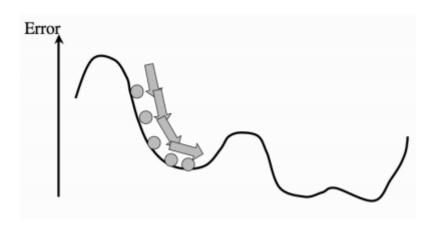
$$E(\mathbf{t}, \mathbf{y}) = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{N} (y_{k-} t_k)^2$$

$$\frac{1}{2}$$
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<mark>是连续的和可微分的。</mark>





常数c指示了学习步幅的大小

#### Delta规则

$$Error = \frac{1}{2} \sum_{i} (d_i - O_i)^2 \qquad \overrightarrow{o}(\vec{x}) = f(\vec{w} \cdot \vec{x})$$

$$\Delta W_{k} = -c \frac{\partial Error}{\partial W_{k}} = -c \frac{\partial Error}{\partial O_{i}} * \frac{\partial O_{i}}{\partial W_{k}}$$

此页符号标记前后有差异, 学习时请注意

$$\frac{\partial Error}{\partial O_i} = \frac{\partial (\frac{1}{2} \sum_{i} (d_i - O_i)^2)}{\partial O_i} = \frac{\partial \frac{1}{2} * (d_i - O_i)^2}{\partial O_i}$$

因为输出层中的节点的误差并不影响其他节点,因此

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

与感知机调节权值方法一致!

### Delta规则

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

$$\overrightarrow{O}(\overrightarrow{x}) = f(\overrightarrow{w} \cdot \overrightarrow{x})$$

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

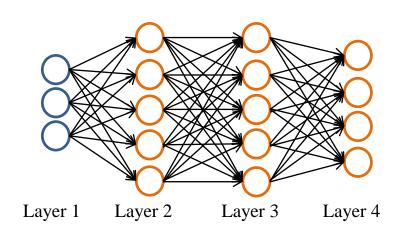
$$= c(d_i - O_i) f'(\text{net}_i) * X_k$$

#### 思考与<mark>感知机学习规则</mark>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<u>误差反传算法(BP)的核心</u>,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

第一个就是对 $\frac{1}{2}x^2$ 求导(对x),它是x;

推导所使用的数学技巧

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,<u>输入信号</u>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<u>误差</u>

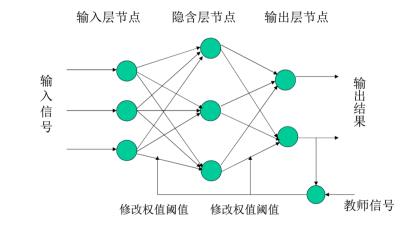
<u>信号</u>。误差信号通过网络反向一层一层传播,在传播过程中对网络突触的权值进行修正。

- □ 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

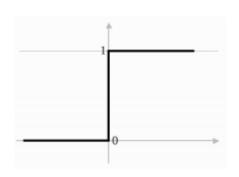
- ✓三层或三层以上结构
- ✓无反馈
- ✓层内无互连
- ✓输入层+输出层+隐含层
- ✓采用误差反向传播学习算法



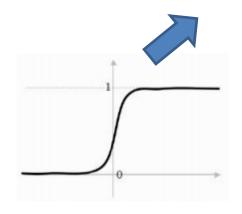
BP本质是学习算法,被广泛应用到MLP, ADE, KBF, DNN中。 但很多时候,又把MLP称为BP神经网络。

# 激励函数

#### 饱和型函数



感知机中所使用的阶 跃函数

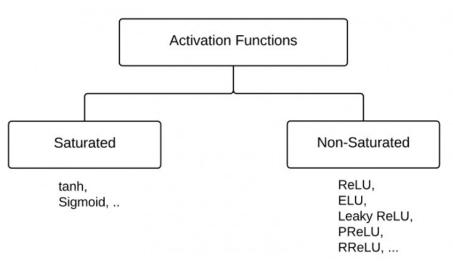


BP神经网络中

所常用的Sigmod函数

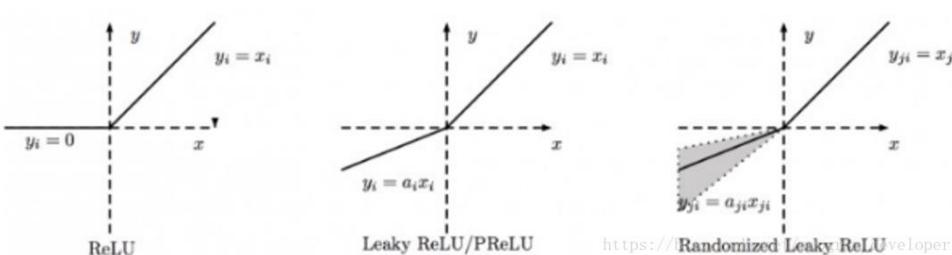
$$a = g(h) = \frac{1}{1 + \exp(-\beta h)}$$

# 激励函数的分类

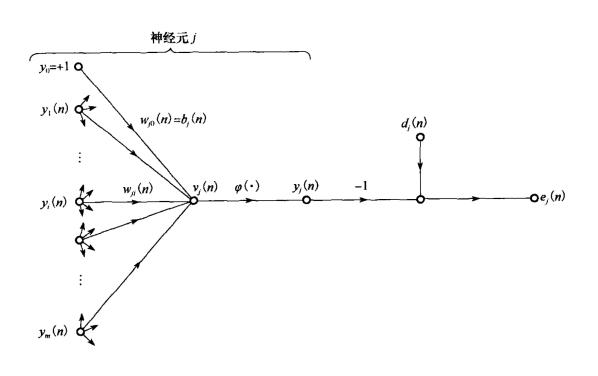


#### 饱和型激励函数的缺点:

- 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

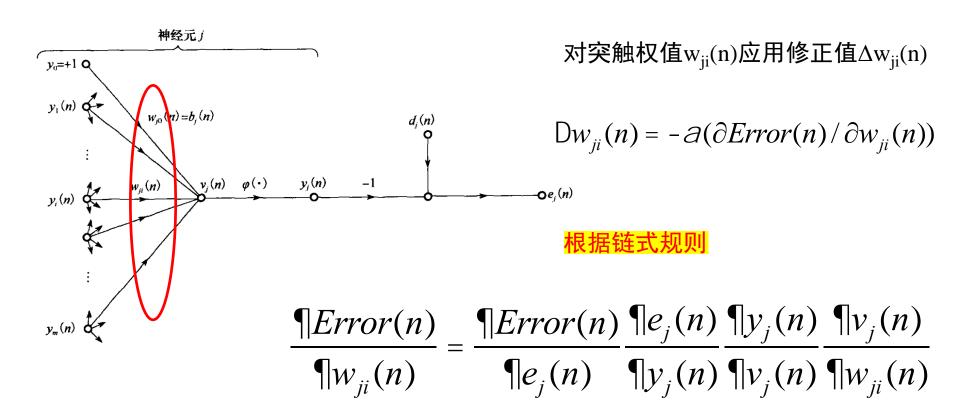


#### 图解

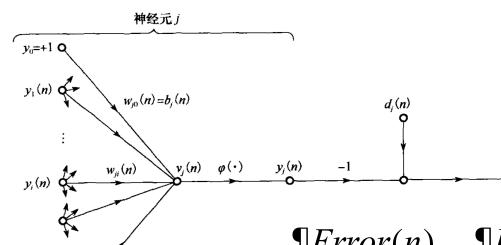
- ✓ y<sub>i</sub> 第j个神经元的第i个输入
- ✓ n 第n个训练样本
- ✓ j 第j个神经元
- ✓ w<sub>ji</sub> 第j个神经元和第i个输入 间的权值
- ✓ v 输入加权和
- ✓ Φ激活函数
- ✓ y<sub>j</sub>第j个神经元的输出
- ✓ d 样本真实值
- ✓ e 误差值

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



偏导数代表一个敏感因子,决定了突触权值w<sub>ii</sub>在权值空间的搜索方向。



#### 此例权值下标ii

#### 表示是由第i个节点连向第j个节点

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

 $-\mathbf{O}e_i(n)$ 

#### 对于误差的定义

Error(n) = 
$$\frac{1}{2} \mathop{a}_{j} (d_{j}(n) - y_{j}(n))^{2} = \frac{1}{2} \mathop{a}_{j} e_{j}(n)^{2}$$

#### 对于误差的定义

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

#### 神经元j输出的函数信号

$$y_j(n) = f_j(v_j(n))$$

#### 诱导局部域

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

神经元 
$$j$$

$$y_{ij}=10$$

$$y_{ij}(n)$$

$$w_{ji}(n)$$

$$\frac{qError(n)}{q_{ij}(n)} = \frac{qError(n)}{q_{ij}(n)} \frac{q_{ij}(n)}{q_{ij}(n)} \frac{q_{ij}(n)}{q_{ij}(n)} \frac{q_{ij}(n)}{q_{ij}(n)}$$

#### 因此我们可以得到

$$\frac{\P Error(n)}{\P e_{j}(n)} = e_{j}(n)$$

$$\frac{\P e_{j}(n)}{\P y_{j}(n)} = -1$$

$$\frac{\P y_{j}(n)}{\P v_{j}(n)} = j_{j}'(v_{j}(n))$$

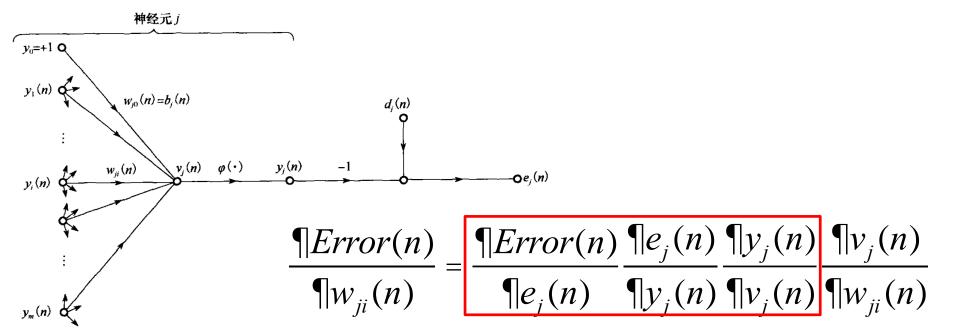
$$\frac{\P v_{j}(n)}{\P w_{ji}(n)} = y_{i}(n)$$

#### 因此可求的偏导数为

$$\frac{\P Error(n)}{\P w_{ji}(n)} = \frac{-e_j(n)j'_j'(v_j(n))y_i(n)}{P v_{ji}(n)}$$



和Delta规则没区别



#### 定义局域梯度delta<sub>i</sub>(n)

$$delta_{j}(n) = -\frac{\P Error(n)}{\P v_{j}(n)}$$

#### 因此权值修正定义为

$$Dw_{ji}(n) = \partial^* delta_j(n)^* y_i(n)$$

### 权值修正的两种情况

□ Case1: 神经元j是输出层节点

$$Dw_{ji}(n) = \partial^* delta_j(n)^* y_i(n)$$

求解局域梯度delta<sub>i</sub>(n):

$$delta_{j}(n) = -\frac{\P Error(n)}{\P v_{j}(n)} = -\frac{\P Error(n)}{\P e_{j}(n)} \frac{\P e_{j}(n)}{\P y_{j}(n)} \frac{\P y_{j}(n)}{\P v_{j}(n)} = e_{j}(n) j_{j}'(v_{j}(n))$$

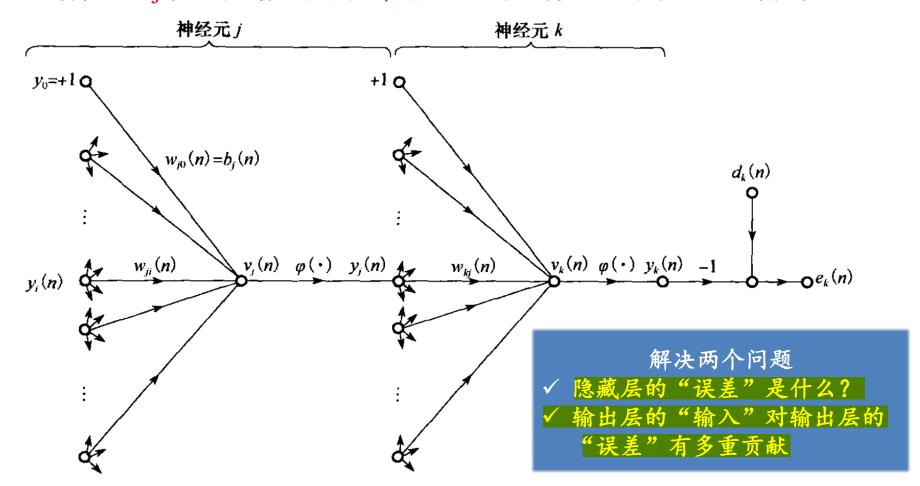
因此权值修正值为:

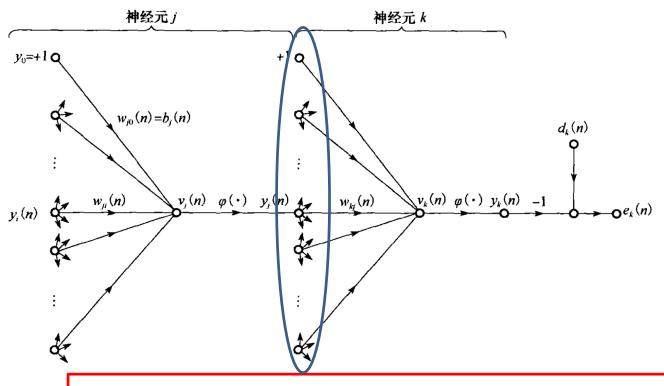
$$Dw_{ji}(n) = \partial^* e_j(n)^* j_j'(v_j(n))^* y_i(n)$$

### 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。

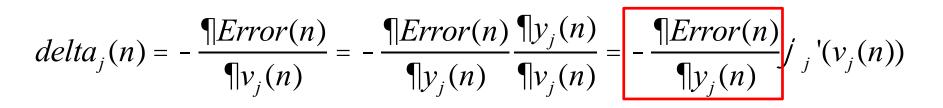


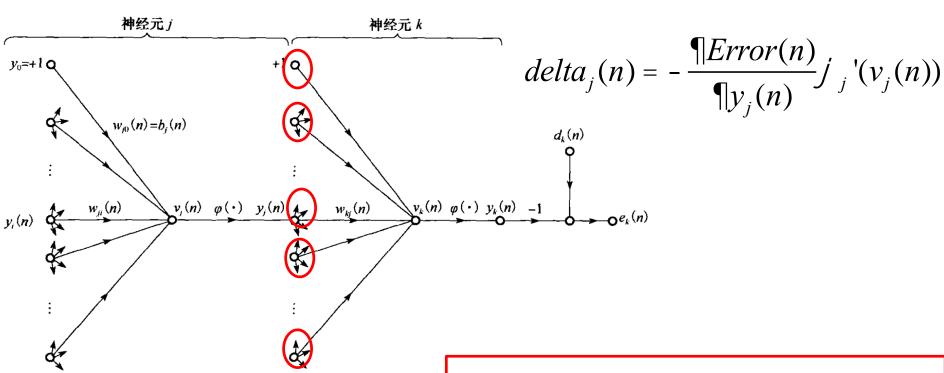


隐藏层神经元不能直接访问,但是它们<mark>必须分担对网络输出的误差责任</mark>。 如何分配这种共担的责任,就是<u>信用分配问题</u>。

注意分子部分

#### 重新求解局域梯度delta<sub>i</sub>(n)





#### 假设神经元k为输出层神经元

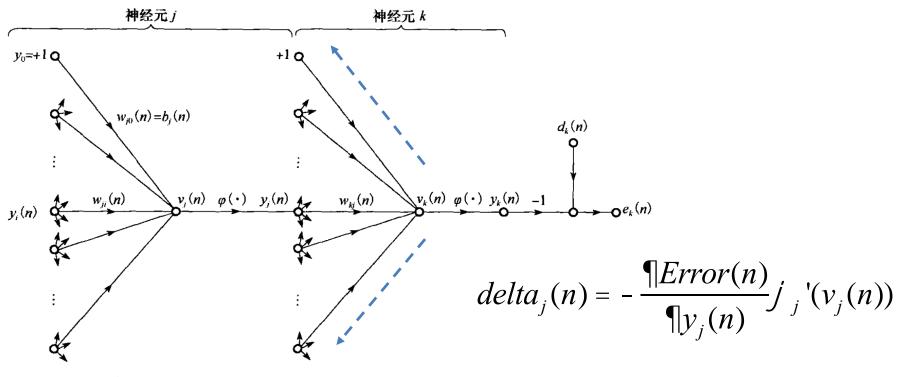
$$Error(n) = \frac{1}{2} \mathop{\mathring{a}}_{k}^{a} e_{k}^{2}(n)$$

则可求解

#### 注意为什么这样

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



又因为

$$e_k(n) = d_k(n) - y_k(n) = d_k(n) - j_k(v_k(n))$$
 所以

$$\frac{\P Error(n)}{\P y_j(n)} = - \mathop{\stackrel{\circ}{a}}_{k} e_k(n) f_k'(v_k(n)) w_{kj}(n)$$

根据局域梯度的定义,可得

$$\frac{\P Error(n)}{\P y_{i}(n)} = - \mathop{\mathring{a}}_{k} delta_{k}(n) w_{kj}(n)$$



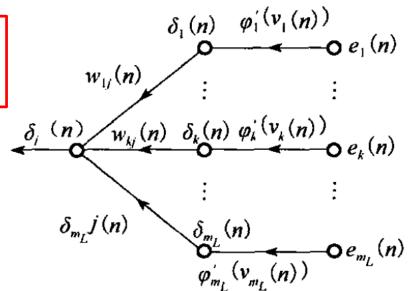
认真思考此公式的物理意义

这个公式是反向传播的"真谛"

因此

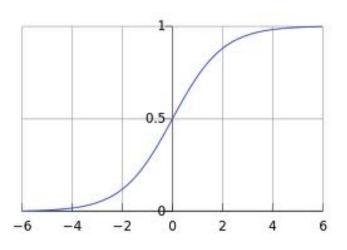
$$delta_{j}(n) = \int_{j} '(v_{j}(n)) \stackrel{\circ}{a} delta_{k}(n) w_{kj}(n)$$

$$Dw_{ii}(n) = a * delta_{i}(n) * y_{i}(n)$$



- □ 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



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

#### □ 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)。

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

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

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

# 反向传播算法

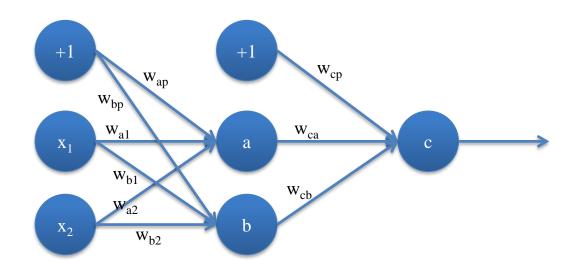
初始化: 随机挑选突触权值

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

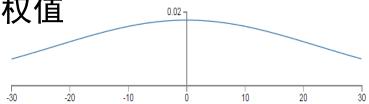
# 其他议题

- □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

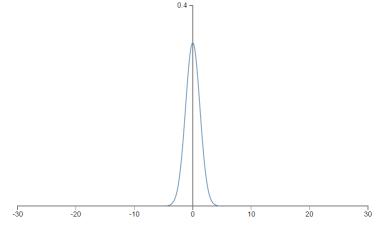
### 初始权值

□ 模型选择,需要多次设定初始随机权值





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



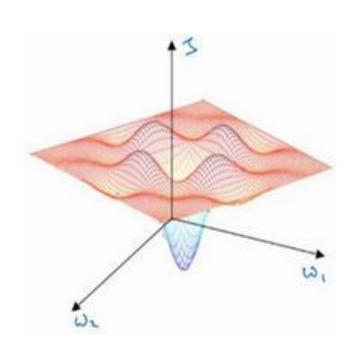
# 激活函数选择

- □ 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)

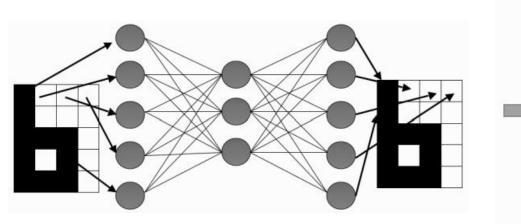
# 大纲

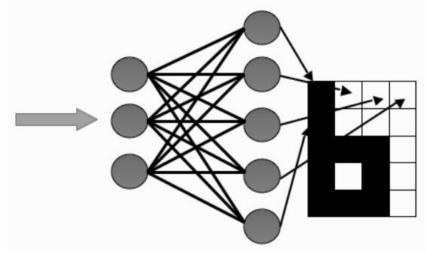
多层感知机MLP

自动编码器AUTOENCODER

径向基网络RBF

# 自动编码器



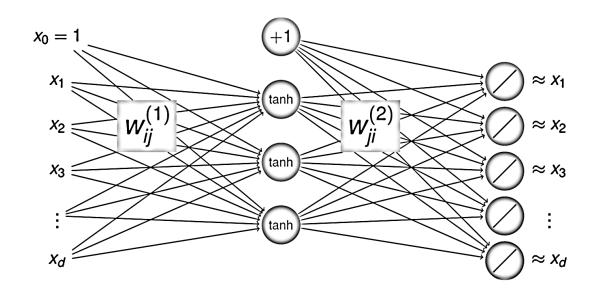


 $\phi: \mathcal{X} 
ightarrow \mathcal{F}$ 

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

 $\phi, \psi = rg \min_{\phi, \psi} \|X - (\psi \circ \phi)X\|^2$ 

### 自动编码器



- ✓ W<sub>ij</sub>作为W<sub>ji</sub>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

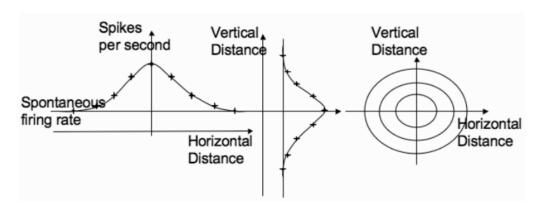
#### 感受野 → 編輯 Dep bit Division



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,

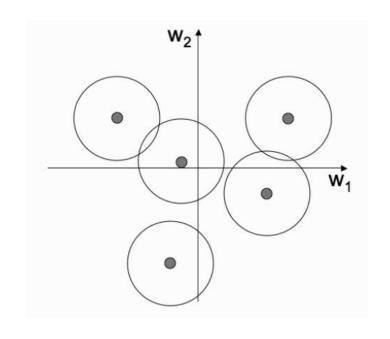
在视觉通路上,视网膜上的光感受器(杆体细胞和锥体细胞); 胞,外膝状体细胞以及视觉皮层中的神经细胞。反过来,任何一种 依赖于视网膜上的许多光感受器。我们称直接或间接影响某一特定 (receptive field).

### 感受野



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

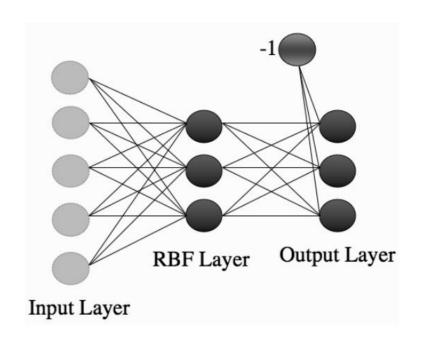
注意: 径向基函数的选择有很多种, 例如最简单的欧式距离

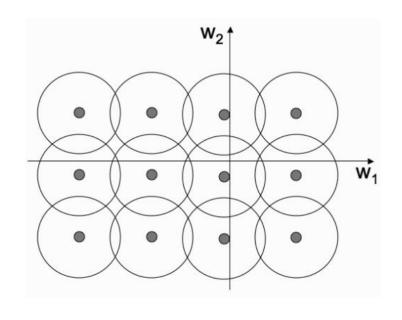


中心点: 径向基位置:

圆圈大小:感受野尺寸。

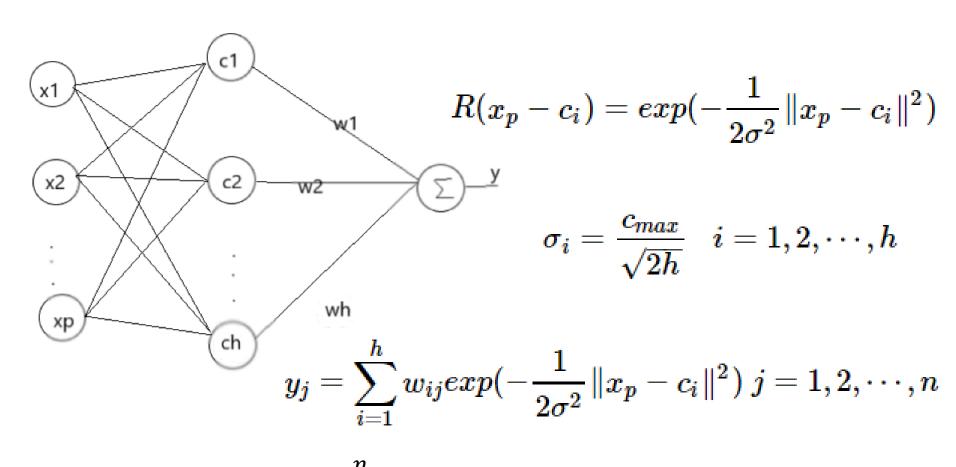
### 径向基网络





- □ 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



损失 
$$ERROR = \sum_{i}^{N} (d_{j} - \phi_{j}(y_{j}))$$

# 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

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

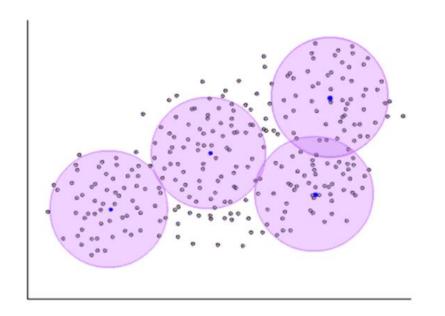
# 径向基网络的原理

- □ 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

$$\kappa(x_1,x_2) = \exp\!\left(-rac{\|x_1-x_2\|^2}{2\sigma^2}
ight)$$

# 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 : <a href="http://yann.lecun.com/exdb/mnist/">http://yann.lecun.com/exdb/mnist/</a> (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!