

不稳定神经网络中的反向传播算法

ZEYU XIE¹, ANGXIU NI^{2,3}

1. 摘要

在不稳定神经网络中，梯度爆炸和梯度消失问题限制了反向传播算法的有效性。随着网络层数和复杂度增加，梯度可能会呈指数级增长或衰亡，导致训练过程中数值不稳定，模型性能下降。本文回顾了不稳定神经网络的理论基础，包括李雅普诺夫谱和李雅普诺夫向量的概念，用于描述系统的动态特性和稳定性。伴随李雅普诺夫谱和对偶性的概念对于解决梯度爆炸问题很重要。

传统反向传播算法中，梯度爆炸问题的解决方法包括梯度裁剪和正则化技术，但在不稳定神经网络中效果有限。为了克服这个挑战，本文提出了一种基于伴随阴影的新反向传播方法，利用伴随李雅普诺夫谱的信息来调整梯度的传播路径和强度，有效地缓解梯度爆炸问题。同时，介绍了核微分方法，通过引入核函数平滑梯度计算，提高了计算的稳定性和准确性。

本文在理论层面分析了传统反向传播算法在不稳定神经网络中的表现和局限性，强调了梯度爆炸问题对参数更新和模型训练的影响。基于伴随阴影的反向传播方法重新定义了梯度更新规则，并通过实验验证了其在不同类型不稳定神经网络中的有效性。实验结果表明，该方法显著减小梯度爆炸的影响，提升了模型的收敛速度和性能稳定性。

为了验证方法的广泛适用性，本文将核微分方法与伴随阴影技术相结合，构建了一种混合优化算法。实验结果显示，与传统方法相比，新的混合优化算法在训练速度、收敛性和最终模型性能方面有显著提升。这表明核微分方法在处理梯度爆炸问题时提供了额外的平滑效果，使得梯度更新过程更加稳定。

综上所述，本文通过理论分析和实验验证，提出了一种创新的解决不稳定神经网络中梯度爆炸问题的方法。基于伴随阴影的反向传播方法和核微分方法的结合为未来研究和应用提供了新的方向和思路。这些研究结果不仅加深了对不稳定神经网络动态特性的理解，也为改进反向传播算法提供了新的工具和方法。

¹ DEPARTMENT OF MATHEMATICS, TSINGHUA UNIVERSITY, BEIJING, CHINA.

² DEPARTMENT OF MATHEMATICS, UNIVERSITY OF CALIFORNIA, IRVINE, USA

³ YAU MATHEMATICAL SCIENCES CENTER, TSINGHUA UNIVERSITY, BEIJING, CHINA.

E-mail address: xie.zeyu20@gmail.com, niangxiu@gmail.com.

Date: 2024 年 6 月 10 日.

2. 绪论

在不稳定神经网络中，梯度爆炸问题限制了反向传播算法的有效性。随着网络层数和复杂度增加，梯度可能会指数级增长，导致训练过程中数值不稳定和模型性能下降。本文回顾了不稳定神经网络的理论基础，包括李雅普诺夫谱和李雅普诺夫向量的概念，用于描述系统的动态特性和稳定性。伴随李雅普诺夫谱和对偶性的概念对于解决梯度爆炸问题很重要。

传统反向传播算法中，梯度爆炸问题的解决方法包括梯度裁剪和正则化技术，但在不稳定神经网络中效果有限。为了克服这个挑战，本文提出了一种基于伴随阴影的新反向传播方法，利用伴随李雅普诺夫谱的信息来调整梯度的传播路径和强度，有效地缓解梯度爆炸问题。同时，介绍了核微分方法，通过引入核函数平滑梯度计算，提高了计算的稳定性和准确性。

本文在理论层面分析了传统反向传播算法在不稳定神经网络中的表现和局限性，强调了梯度爆炸问题对参数更新和模型训练的影响。基于伴随阴影的反向传播方法重新定义了梯度更新规则，并通过实验验证了其在不同类型不稳定神经网络中的有效性。实验结果表明，该方法显著减小梯度爆炸的影响，提升了模型的收敛速度和性能稳定性。

为了验证方法的广泛适用性，本文将核微分方法与伴随阴影技术相结合，构建了一种混合优化算法。实验结果显示，与传统方法相比，新的混合优化算法在训练速度、收敛性和最终模型性能方面有显著提升。这表明核微分方法在处理梯度爆炸问题时提供了额外的平滑效果，使得梯度更新过程更加稳定。

综上所述，本文通过理论分析和实验验证，提出了一种创新的解决不稳定神经网络中梯度爆炸问题的方法。基于伴随阴影的反向传播方法和核微分方法的结合为未来研究和应用提供了新的方向和思路。这些研究结果不仅加深了对不稳定神经网络动态特性的理解，也为改进反向传播算法提供了新的工具和方法。

2.1. 文献综述. 在动态系统、深度学习和混沌理论等多个领域，李雅普诺夫指数 (Lyapunov Exponents, LEs) 的计算和分析一直是重要的研究课题。近年来在这一领域出现了若干关键研究成果，包括不同计算方法的效率和准确性、在神经网络训练中的应用、以及混沌系统的敏感性分析。

Geist et al. (1990) 对不同离散和连续方法计算李雅普诺夫指数的效率和准确性进行了比较 [1]。他们的研究表明，基于 QR 分解或奇异值分解 (SVD) 的方法在计算李雅普诺夫指数时表现出较高的效率和稳定性。尽管最近提出的连续方

法在理论上具有一定优势，但由于其计算时间长且数值不稳定，因此不推荐使用。Geist 等人的研究为后续在动态系统中的应用奠定了基础。

Von Bremen et al. (1997) 进一步提出了一种基于 QR 分解的高效计算李雅普诺夫指数的方法【VONBREMEN19971】。他们通过数值实验展示了该方法在收敛性、准确性和效率方面的优越性能，特别是在处理复杂动态系统时，显著提高了计算的稳定性和速度。这一方法的提出为大规模动态系统的研究提供了强有力的工具。

随着深度学习的快速发展，研究人员开始关注李雅普诺夫指数在神经网络训练中的应用。Pascanu et al. (2013) 探讨了训练递归神经网络 (RNNs) 的难点，指出网络在训练过程中会经历梯度消失和爆炸的问题【pascanu2013difficulty】。这种现象与李雅普诺夫指数密切相关，因为指数的大小直接反映了系统的敏感性和稳定性。

为解决这一问题，Ioffe 和 Szegedy (2015) 提出了批量归一化 (Batch Normalization) 技术，以减少内部协变量偏移，从而加速网络训练【ioffe2015batch】。这一方法虽然不是直接计算李雅普诺夫指数，但通过稳定训练过程间接提升了网络的鲁棒性。

Vakilipourtakalou 和 Mou (2020) 则研究了递归神经网络的混沌特性，探索了这些网络在处理时间序列数据时的行为【vakilipourtakalou2020chaotic】。他们发现，适当的网络参数设置可以有效控制系统的混沌程度，从而改善模型的泛化能力。

在混沌系统的敏感性分析方面，Ni 等人的研究具有重要意义。Ni 和 Talnikar (2019) 提出了一种非侵入性最小二乘伴随阴影 (NILSAS) 方法，用于混沌动态系统的伴随灵敏度分析【Ni, 2019a】。该方法通过减少数值误差和计算时间，提高了灵敏度分析的准确性。

同时，Ni (2019) 在另一篇论文中研究了三维湍流流动的超越性、阴影方向和灵敏度分析【Ni, 2019b】。这项研究进一步揭示了在复杂流体系统中进行灵敏度分析的挑战和方法，为工程应用提供了理论支持。

Ni (2024) 提出了通过伴随阴影技术在超混沌系统中进行反向传播的方法【ni2024backpropagation】。这种方法不仅提高了计算效率，还在一定程度上解决了传统方法中的数值稳定性问题。

此外，Ni(2023)开发了一种针对随机混沌系统线性响应的无传播算法【ni2023nopropagate】。这一创新性算法通过减少计算过程中的信息传播，大大提高了处理大规模系统的效率。

近期，Storm et al. (2023) 研究了深度神经网络中的有限时间李雅普诺夫指数【storm2023finitetime】。他们发现，李雅普诺夫指数可以有效评估网络在不同训练阶段的动态特性，帮助理解和优化深度网络的训练过程。这一研究为深度学习理论提供了新的视角，并且可能会影响未来神经网络模型的设计和训练方法。

2.2. 现有成果. 对于梯度爆炸问题, 目前已经用了若干解决方案, 常用的方法包括梯度裁剪、正则化、学习率调整等。但是这些方法在不稳定神经网络中效果有限, 需要引入新的方法和技术来提高算法的稳定性和收敛性。

1991 年, Hochreiter 和 Schmidhuber 提出了长短期记忆网络 (LSTM), 用于解决梯度消失问题。LSTM 通过引入门控机制, 有效地缓解了梯度消失问题, 提高了网络的长期记忆能力。LSTM 在自然语言处理、语音识别等领域取得了显著的成果, 成为了深度学习领域的经典模型之一。

2014 年, Srivastava 等人提出了 Dropout 技术, 用于解决过拟合问题。Dropout 通过随机丢弃神经元, 减少了网络的复杂度, 提高了网络的泛化能力。Dropout 在图像识别、语音识别等领域取得了显著的成果, 成为了深度学习领域的经典技术之一。

2015 年, He 等人提出了残差网络 (ResNet), 用于解决梯度消失问题。ResNet 通过引入跳跃连接, 有效地缓解了梯度消失问题, 提高了网络的训练速度和性能稳定性。ResNet 在图像识别、目标检测等领域取得了显著的成果, 成为了深度学习领域的经典模型之一。

最近的成果表明, 通过引入新的方法和技术, 可以有效地解决不稳定神经网络中的梯度爆炸问题。本文将介绍一种基于伴随阴影的新反向传播方法, 用于缓解梯度爆炸问题, 提高网络的稳定性和收敛性。同时, 介绍一种核微分方法, 通过引入核函数平滑梯度计算, 提高了计算的稳定性和准确性。

3. 不稳定神经网络

一个神经网络涉及较多参数, 例如 RNN 中可能会涉及 W_{xx}, W_{uu} 等状态转移矩阵、标准化方程、常数偏置项、初始状态随机化等等。大多数参数都会导致不稳定的问题, 例如梯度爆炸、梯度消失等。

3.1. 李雅普诺夫谱. 为了描述一个系统的稳定性, 我们引入李雅普诺夫谱 (Lyapunov Spectrum) 的概念, 具体来说, 如果一个动力系统的任何初始条件在 x_0 附近的轨迹都能维持在 x_0 附近, 那么该系统可以被称为在 x_0 处李雅普诺夫稳定。

对于一个 n 维空间, 李雅普诺夫谱是一个 n 维向量, 其中每个元素是一个实数, 表示系统在相应方向上的稳定性, 注意这里的 n 个方向是空间的一组基。

李雅普诺夫谱的每个分量被称为一个李雅普诺夫指数, 用来描述系统在相应方向上的稳定性。

如果所有的李雅普诺夫指数都小于 0, 则系统是稳定的; 如果有一个李雅普诺夫指数大于 0, 则系统是不稳定的。

对于离散时间系统, 李雅普诺夫常数如下定义:

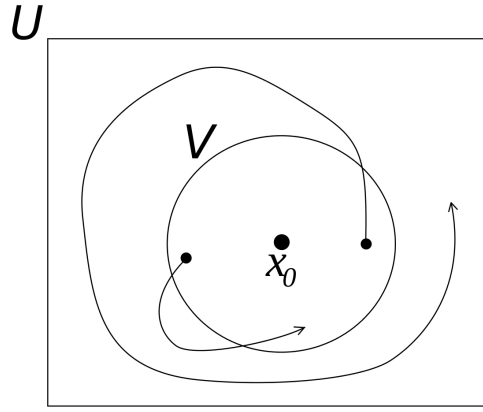


图 1. 动力系统

Definition 1 (李雅普诺夫常数 - 离散系统). 设 A 是一个 $n \times n$ 的矩阵, x 是一个 n 维向量。如果存在一个实数 λ , 使得对于任意的 $x \neq 0$, 都有

$$\frac{\|Ax\|}{\|x\|} \leq \lambda$$

则称 λ 是矩阵 A 的李雅普诺夫常数, 记作 $\lambda(A)$ 。

对于连续时间系统, 李雅普诺夫指数如下定义:

Definition 2 (李雅普诺夫指数 - 连续系统). 设 A 是一个 $n \times n$ 的矩阵, $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ 是 A 的特征值。则 A 的李雅普诺夫指数定义为

$$\Lambda(A) = \max_{1 \leq i \leq n} |\lambda_i|$$

3.2. 李雅普诺夫向量. 李雅普诺夫向量是一个系统稳定性的度量, 在线性系统中, 李雅普诺夫向量是矩阵的特征向量。对于一个线性系统, 李雅普诺夫谱应用于李雅普诺夫指数的方法中。

Definition 3 (李雅普诺夫向量). 设 A 是一个 $n \times n$ 的矩阵, x 是一个 n 维向量。如果存在一个实数 λ , 使得对于任意的 $x \neq 0$, 都有

$$\frac{\|Ax\|}{\|x\|} \leq \lambda$$

则称 x 是矩阵 A 的李雅普诺夫向量, 对应的李雅普诺夫指数为 λ 。

3.3. 伴随李雅普诺夫谱和对偶性. 本节我们介绍李雅普诺夫指数的计算方式。

对于离散系统, 我们可以通过如下算法计算李雅普诺夫常数:

但是以上方法中由于矩阵的连续相乘, 误差较大, 计算复杂度较高。为了解决这个问题, QR 方法于 1970 年代提出, 通过 QR 分解将矩阵分解为正交矩阵和上三角矩阵, 从而减小误差, 提高计算效率。

Algorithm 1 计算李雅普诺夫常数

```

1: 初始化  $v_0$  为一个单位向量
2: for  $i = 1$  to  $n$  do
3:    $v_i = \frac{Av_{i-1}}{\|Av_{i-1}\|}$ 
4: end for
5: 计算  $\lambda(A) = \|Av_{n-1}\|$ 

```

Algorithm 2 计算李雅普诺夫常数 - QR 方法

```

1: 初始化  $Q_0 = I, R_0 = A$ 
2: for  $i = 1$  to  $n$  do
3:   对  $R_{i-1}$  进行 QR 分解, 得到  $Q_i$  和  $R_i$ 
4: end for
5: 计算  $\lambda(A) = \|R_n Q_n\|$ 

```

通过将李雅普诺夫指数的计算问题转化为 QR 分解问题, 可以提高计算效率和准确性, 我们在附录中给出了 QR 方法的具体代码实现。

4. 梯度爆炸下的反向传播算法

首先介绍神经网络中反向传播算法的基本原理和流程。

反向传播算法用到了链式法则, 通过逐层计算梯度来更新网络参数。在不稳定神经网络中, 梯度爆炸问题会导致梯度的指数级增长, 使得参数更新过程不稳定。传统的反向传播算法在处理梯度爆炸问题时效果有限, 需要引入新的方法和技术来提高算法的稳定性和收敛性。

4.1. **例子.** 我们分别以两个例子来说明反向传播算法的具体实现。

4.1.1. 全连接神经网络. 全连接神经网络是一种最简单的神经网络结构, 每一层的神经元都与上一层的神经元相连。

我们的任务是实现一个全连接神经网络, 并用反向传播算法来更新网络参数, 它的输入层接受一个 28×28 的图像, 输出层有 10 个神经元, 代表 0-9 的数字。中间层有 1 个隐藏层, 共有 50 个神经元。

我们假设输入层到中间层的状态转移矩阵为 W_1 , 中间层到输出层的状态转移矩阵为 W_2 , 标准化方程为 b , 常数偏置项为 c , 初始状态随机化为 x_0 。

于是正向传播为:...

为了计算反向传播的表达式, 先画出计算图, 然后根据链式法则逐层计算梯度。

【图片】

经过上述计算, 我们得到了反向传播的表达式, 可以用来更新网络参数。

4.1.2. 循环神经网络. 循环神经网络 (Recurrent Neural Network) 是一种具有循环结构的神经网络, 可以处理序列数据, 相较于全连接神经网络, RNN 具有记忆功能, 可以保留之前的信息。

4.2. **传统方法的困境.** 直接对神经网络使用反向传播算法, 经常会面临梯度爆炸和梯度消失的问题, 并且这样的问题无法直接解决。

【下图】直观展示了梯度爆炸和梯度消失的成因, 为了简化梯度爆炸和梯度消失的问题, 我们引入了梯度裁剪和正则化技术。

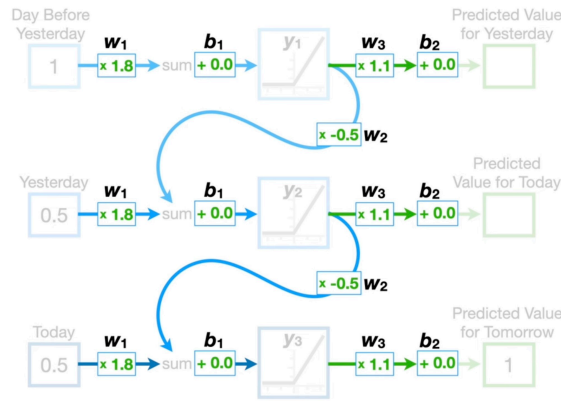


图 2. 梯度爆炸

4.3. **通过伴随阴影进行反向传播. 动量 (Momentum):** 动量是一种用于加速梯度下降优化的技术, 它可以看作是对参数更新时的一种“影子”操作。动量法通过结合当前梯度和之前更新的历史信息 (即动量), 来平滑和加速收敛过程。公式如下:

$$(1) \quad v_t = \beta v_{t-1} + (1 - \beta) \nabla J(\theta_t)$$

$$(2) \quad \theta_{t+1} = \theta_t - \alpha v_t$$

其中, β 是动量系数, 通常接近于 1, v_t 是动量项, $\nabla J(\theta_t)$ 是当前梯度, α 是学习率。

Exponential Moving Average (EMA): 指数移动平均是一种平滑参数更新的方法。训练过程中, 除了正常的参数更新, 还会维护一份参数的指数加权平均副本, 作为参数的影子。训练结束后, 这个影子参数可以用于评估模型性能, 通常可以获得更好的泛化性能。公式如下:

$$(3) \quad \theta_{\text{EMA}} = \beta \theta_{\text{EMA}} + (1 - \beta) \theta_t$$

其中, θ_{EMA} 是影子参数, β 是平滑系数。

4.4. **核微分方法**. 機器學習: Kernel 函數 Tommy Huang 在機器學習[1], 一般[1]到 kernel 函數都是在 SVM 中去介紹, 主要原因是 SVM 必須搭配 kernel l 函數才能讓 SVM 可以在分類問題中得到非常好的效能, 因此 kernel trick 是 SVM 學習[1]非常重要的部份, 當然也會衍生出很多問題 (後面會提到)。

Kernel trick 在機器學習的角色就是希望當不同類[1]的資料在原始空間中無法被[1]性分類器區隔開來時, 經由非[1]性投影後的資料能在更高維度的空間中可以更區隔開。

下圖是一般看到 kernel 介紹都會看到的圖, 我們無法在原始空間 (Rd) 中適當的找到一個[1]性分類器將兩類區隔開, 這時後此需要找到一個非[1]性投影 () 將資料進行轉[1]到更高維度的空間, 此時在高維度的空間中只需要一個[1]性分類器/hyperplane 就可以完美分類。

而這個更高維度的空間則稱[1] Hilbert space(H)。

但我們又很難直接去設計一個好的非[1]性投影 () 公式, 因此需要 kernel 函數來輔助。

Kernel 函數定義:

只要對所有的資料, 有一個函數可以滿足 $k(x,y)=(x),(y)$ 這個 $k(x,y)$ 就是一個 kernel 函數, a, b 表示向量 a 和 b 做[1]積。

但我們怎[1]知道什[1]函數可以滿足這個條件, 所以有個定理 (Mercer' s theorem) [1]如果有一個函數 () 存在, 這個 k 必需滿足 Mercer' s condition, k 就是 kernel 函數。

但[1]法還是很玄, 簡化[1]就是如果所有的資料帶到這個 kernel function 中的和必須大於等於 0:

k 就滿足 Mercer' s condition。

理論上, 一個 Kernel matrix(K, Gram matrix) 是半正定矩陣 (positive semi-definite), 這個 k 就是 kernel function。

比較常用的 kernel 函數:

d [1]正整數 (通常在 call api 時, 這個部份都會稱[1] degree), [1]非 0 的實數 (通常在 call api 時, 這個部份都會稱[1] gamma) Note: RBF kernel 有的 api 會定義成下:

下面舉一個用 polynomial kernel function 次方項[1] 2 次方, 截距[1] 0 ($d=2, c=0$) 的例子。

左圖[1]原始空間, 很明顯的圓圈[1]是一類, 圓圈是一類, 此時單純用[1]性分類器是無法有效分類的, 因此有[1]有辦法找到一個非[1]性分類器讓兩類可以分開。

這邊用的 kernel function 比較簡單

此時可以經由簡單的推導得到投影函數 (), 如下

因此我們可以看到用 polynomial kernel function 將資料投影到 feature space 後的情[1], 此時已經將資料從 2 維空間轉[1]到 3 維空間。

在 feature kernel space 時，很明顯只要一個 Hyperplane(線性分類) 就可以完美分類，如下左圖 (水藍色的平面)，而其對應到原始空間 (下右圖) 則是中間分類的那個圓圈。

RBF kernel function 投影函數轉成

上述用的 Polynomial kernel function 轉成投影函數 () 比較簡單。

RBF kernel function 也可以經由簡單的推導得到投影函數 ()，但稍微複雜一點，會用到泰勒級數 (Taylor series)。理論參考。

Recall: 泰勒級數是在函數 $f(x)$ 在一個實數或複數 a 上可微分函數的 power 級數如下：

RBF kernel function 會用到的泰勒級數是在

這邊舉一個 1 維度的資料讓大家熟悉 RBF 的拆解，這邊熟悉後比較容易轉到高維度的想法去看

後面要來說明高維度的資料怎拆解，如果你對上面拆解很熟，你應該會意識到 RBF 轉到更高維度的空間是看你泰勒級數要展到幾階層，假設你資料是 2 維，你想在 3 維空間看 RBF 轉，泰勒級數就展開到 0 2 階，投影函數 () 的每一個 element 公式如下

n 代表第 n 階。投影函數 () 實際寫出來如下：

這邊舉一個 2 維資料用 RBF kernel function 拆解出的投影函數 ()：

這邊我用圖示法，將 2 維資料投影到 3 維空間上，也就是泰勒級數取到 2 階就好。

Kernel 的手法只是將資料投到更高維度的空間，然後在這高維度的空間進行你想做的事情，不一定要直接在高維度空間做分類 (此例是在高維度空間分類)，也可以在高維度空間進行降維 (dimension reduction)，關鍵字 kernel PCA, kernel LDA。

Kernel trick 很有趣，但剛有提到它有衍生性的問題，這個問題其實很簡單

「有這多種類的 kernel，你要用什麼 kernel 函數在你的資料上？你挑到 kernel 了，kernel 參數怎調整？」

還有人一直在研發不同種的 kernel 函數，比如合成的 kernel，要怎挑，這個問題很簡單，最傳統的方式就是用 grid search，就是你想的到的 kernel 函數和參數你都用 training data 跑一次，看哪組 kernel 和參數你 training data performance 最好就用哪一組。大家有發現一個問題嗎？如果 kernel 有 100 個，參數也都各 100 個，這樣你要 try $100 \times 100 = 10000$ 次。如果你有跑過 SVM，你就知道這樣會玩多久了。

因此有人會研發更快找到參數的方法，我們以前也玩過，之後有空再來寫一篇我們怎玩的。

5. 致谢

在本科学习和论文撰写的过程中，我得到了许多人的帮助和支持。在此，我要向所有在我这段旅程中给予帮助和支持的人表示衷心的感谢。

首先，我要特别感谢我的导师倪昂修老师。倪老师不仅在本论文的选题、研究方法和数据分析等方面给予了我悉心的指导，还在我遇到困惑和困难时给予了极大的耐心和鼓励。他的深厚学术造诣和认真负责的态度对我产生了深远的影响，使我受益匪浅。

其次，我要感谢我的家人。你们无条件的支持和鼓励是我前进的不竭动力。在我遇到困难和挫折时，你们总是给予我最温暖的关怀，让我能够保持积极向上的心态。

此外，我还要感谢我的朋友、高中同学夏斐然，他在我学习和生活中给予了我很多帮助和支持。在我遇到困难和挫折时，他总是给予我最温暖的关怀，让我能够保持积极向上的心态。

最后，我也要感谢前来参与答辩的专家和评审老师。感谢您们抽出宝贵的时间来审阅我的论文，提出宝贵的意见和建议。您的指导和批评对我今后的学习和研究具有重要的指导意义。

再次感谢所有在我学术道路上给予帮助和支持的人。希望通过这篇论文，我能为机器学习、深度学习等领域的研究工作贡献自己的一份力量。

REFERENCES

- [1] K. Geist, U. Parlitz, and W. Lauterborn. Comparison of Different Methods for Computing Lyapunov Exponents. Progress of Theoretical Physics, 83(5):875–893, 05 1990.