5 Neural Network

加入根据数据调节基函数. 可以固定基函数的数量, 但是基函数可调节. 非线性最优化问题的解.

5.1 前馈神经网络

前向传播:

$$y_k(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{w}) = \sigma\left(\sum_{j=1}^{M} w_{kj}^{(2)} h\left(\sum_{i=1}^{D} w_{ji}^{(1)} x_i + w_{j0}^{(1)}\right) + w_{k0}^{(2)}\right)$$

w 的上标对应于网络的第几层. D 就是第一层神经元个数, M 是第二层, 得到的 y_k 是第三层. $h(\cdot)$ 一般是非线性函数.

每层线性组合完 套一个激活函数, 激活函数输出在套一个线性组合. 依次类推.

- 神经网络在hidden layer使用的是连续的sigmoid非线性函数, 但是感知机使用阶梯函数.

隐含层神经元数量 $<$ 输入神经元数量: 维度降低造成了信息损失.

神经网络的另一个扩展: 引入跨层链接, 每个跨层链接都对应一个可调节参数. 有sigmoid隐含神经元的网络总能模拟跨层链接: 足够小的第一层权值(使隐含层单元是线性的) + 隐层到输出足够大进行补偿.

5.1.1 权空间对称性

对多个不同的权向量 w 的选择, 网络可能产生同样的从输入到输出的映射函数.

对于 M 个隐层结点, 都会有M个这样的"符号改变"对称性, 任何给定的权向量都是 2^M 个等价的权向量中的一个. 任何给定的权向量都属于这种交换对称性产生的$M!$个等价的权向量中的一个, 它对应于$M!$个不同的隐层单元的顺序, 于是网络有一个整体的全空间对称性因子 $M!2^M$.

5.2 网络训练

神经网络就是 从输入变量 x 到输出变量 y 的参数化非线性函数中的一大类.

假设一元目标变量 t 服从高斯分布:

$$p(t \mid \boldsymbol{x}, \boldsymbol{w}) = \mathcal{N}\left(t \mid y(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{w}), \beta^{-1}\right)$$

似然函数取负对数, 有:

$$\frac{\beta}{2} \sum_{n=1}^{N} \{y(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{w}) - t_n\}^2 - \frac{N}{2} \ln \beta + \frac{N}{2} \ln(2\pi)$$

在回归问题中，我们可以把神经网络看成具有一个恒等输出激活函数的模型，对于分类问题，使用交叉熵误差函数而不是平方和误差函数，会使训练速度更快，同时提升泛化性能.

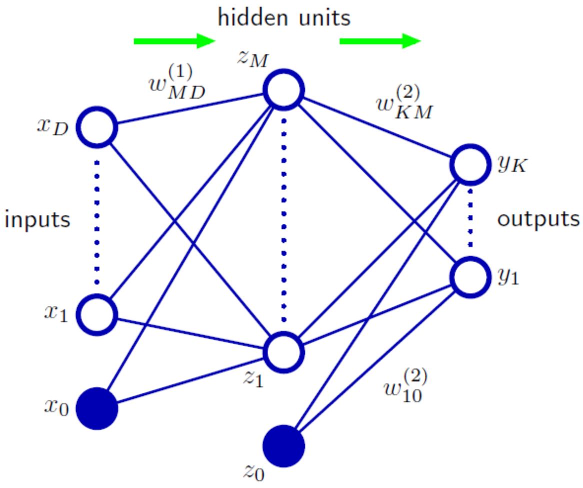


Figure 5.1 Network diagram for the two-layer neural network corresponding to (5.7). The input, hidden, and output variables are represented by nodes, and the weight parameters are represented by links between the nodes, in which the bias parameters are denoted by links coming from additional input and hidden variables x_0 and z_0. Arrows denote the direction of information flow through the network during forward propagation.

上图，神经网络第一层的权向量由各个输出所共享. 神经网络不同的输出之间共享特征可以节省计算量，同时也提升了泛化能力.

5.2.1 参数最优化

考虑寻找能使选定的误差函数 $E(w)$ 达到最小值的权向量 w. 注意这里 $E(w)$ 是光滑的连续函数，也就是梯度下降那一套:

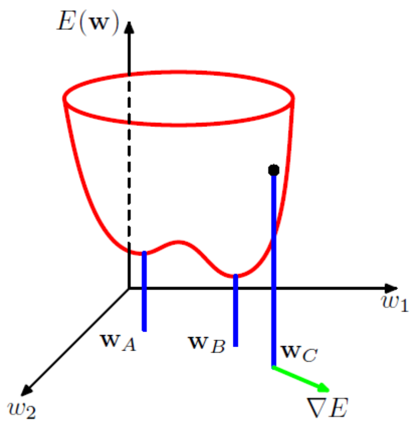


Figure 5.5 Geometrical view of the error function $E(\mathbf{w})$ as a surface sitting over weight space. Point $\mathbf{w}_A$ is a local minimum and $\mathbf{w}_B$ is the global minimum. At any point $\mathbf{w}_C$, the local gradient of the error surface is given by the vector ∇E.

$$\delta E \simeq \delta w^{\mathrm{T}} \nabla E(w)$$
$$to: \nabla E(w) = 0$$

梯度为0的点: 驻点，进一步分为极大/小值点，鞍点.

问题是: 误差函数通常与权值和偏置参数的关系是高度非线性的，也就是说权值空间中会有很多梯度为零的点. 即 `global minimum / local minima`.

迭代的优化方法:

$$w^{(\tau+1)} = w^{(\tau)} + \Delta w^{(\tau)}$$

不同算法涉及到 $\Delta \mathbf{w}^{(\tau)}$ 的不同选择.

5.2.2 局部二次近似

考虑误差函数基于泰勒展开的局部近似. $E(w)$ 在权值空间某点 $\widehat{\boldsymbol{w}}$ 处的泰勒展开:

$$E(\boldsymbol{w}) \simeq E(\widehat{\boldsymbol{w}}) + (\boldsymbol{w} - \widehat{\boldsymbol{w}})^T \boldsymbol{b} + \frac{1}{2}(\boldsymbol{w} - \widehat{\boldsymbol{w}})^T \boldsymbol{H}(\boldsymbol{w} - \widehat{\boldsymbol{w}})$$

其中立方项和更高阶的项已经被省略掉了，这里 b 被定义为 E 的梯度在 $\widehat{\boldsymbol{w}}$ 处的值:

$$b \equiv \nabla E|_{w=\widehat{w}}$$

Hessian矩阵 $\boldsymbol{H}=\nabla\nabla E$ 的元素为：

$$(\boldsymbol{H})_{ij} \equiv \frac{\partial E}{\partial w_i \partial w_j}\bigg|_{w=\widehat{w}}$$

在回归问题中，把神经网络看成一个恒等输出激活函数的模型，$y_k=a_k$，平方和误差函数有：$\frac{\partial E}{\partial a_k}=y_k-t_k$，**梯度的局部近似为：**

$$\nabla E \simeq b+H(w-\widehat{w})$$

- 考虑在 w^* 处的近似，此时 $\nabla E=0$：

$$E(\boldsymbol{w}) \simeq E(\widehat{\boldsymbol{w}})+\frac{1}{2}(\boldsymbol{w}-\boldsymbol{w}^*)^T \boldsymbol{H}(\boldsymbol{w}-\boldsymbol{w}^*)$$

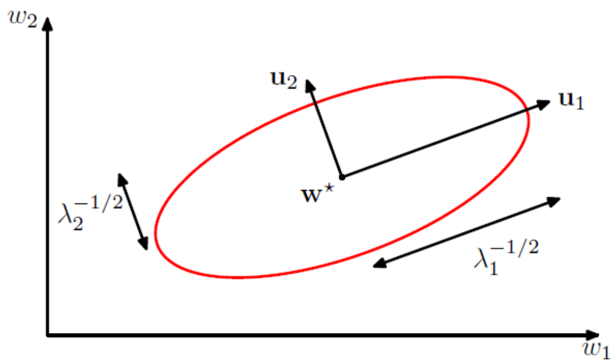
- 以下证：$\boldsymbol{H}$ 是正定的。

  特征值分解，分解后的特征向量构成了完备的单位正交集合。

  从正定的定义出发，$\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{H}\boldsymbol{x}>0$，将 $\boldsymbol{x}$ 用特征向量表出，代入 $\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{H}\boldsymbol{x}$ 即可。

由上知道，$\boldsymbol{H}$ 的特征值都为正，并且在特征向量构成的坐标系中，二次型，所以 $E=const$ 的轮廓线：

Figure 5.6 In the neighbourhood of a minimum $\mathbf{w}^\star$, the error function can be approximated by a quadratic. Contours of constant error are then ellipses whose axes are aligned with the eigenvectors $\mathbf{u}_i$ of the Hessian matrix, with lengths that are inversely proportional to the square roots of the corresponding eigenvectors λ_i.



对于一维权值空间，驻点 $\boldsymbol{w}^*$ 满足如下时取最小值：

$$\frac{\partial^2 E}{\partial w^2}\bigg|_{\boldsymbol{w}^*}>0$$

5.2.3 使用梯度信息

梯度下降法是一个较差的算法，改进：一个在线的版本，顺序梯度下降/随机梯度下降。权值更新每次值依赖于一个数据点：

$$\boldsymbol{w}^{(\tau+1)}=\boldsymbol{w}^{(\tau)}-\eta\nabla E_n\left(\boldsymbol{w}^{(\tau)}\right)$$

这个更新在数据集上循环重复进行，并且既可以顺序地处理数据，也可以随机地有重复地选择数据点。当然也有折中的方法，即每次更新依赖于数据点的一小部分。

如上在线方法的优点是：更高效地处理数据中的冗余性。

5.3 误差反向传播

1. 计算误差函数关于权值的导数。
2. 使用计算的导数调整权值。

5.3.1 误差函数导数的计算

以单隐层 sigmoid，平方和误差函数为例：

最简单的结果：$y_{nk}=y_k\left(\boldsymbol{x}_n,\boldsymbol{w}\right)$。这个误差函数关于一个权值 w_{ji} 的梯度为：

$$\frac{\partial E_n}{\partial w_{ji}} = (y_{nj} - t_{nj})\, x_{ni}$$

更复杂的：每个单元会计算输入的一个加权和，然后经过非线性函数激活：

$$z_j = h(a_j) = h\left(\sum_i w_{ji} z_i\right)$$

结合上式，应用chain rule:

$$\frac{\partial E_n}{\partial w_{ji}} = \frac{\partial E_n}{\partial a_j} \frac{\partial a_j}{\partial w_{ji}}$$

这里 $\delta_j = \frac{\partial E_n}{\partial a_j}$ 被记为误差(error)，反向传播：

$$\delta_j = h'\left(a_j\right) \sum_k w_{kj} \delta_k$$

5.3.2 一个简单的例子

5.3.3 反向传播的效率

周次	教学内容
1	Introduction： Methods of elementary integrations
2	Central motions and Kepler's Law
3	Existence and uniqueness of ODEs： Picard-Lindel"{o}f Theorem
4	Extensibility of solutions
5	Some applications
6	Linear systems：Matrix exponential； First-order autonomous linear systems
7	High order autonomous linear equations； The Tacoma Narrows bridge
8	First order nonautonomous linear equations
9	Nonhomogeneous case
10	High order nonautonomous linear equations
11	Volterra-Lotka system
12	Analysis of equilibrium points
13	Lyapunov methods
14	First-order linear equations with periodic coefficients
15	Topology of trajectories： Positively invariant set；ω limit set of a trajectory
16	Ponicar'{e}-Bendixson theorem（optional）
17	Index theorem in the plane（optional）