五、神经网络

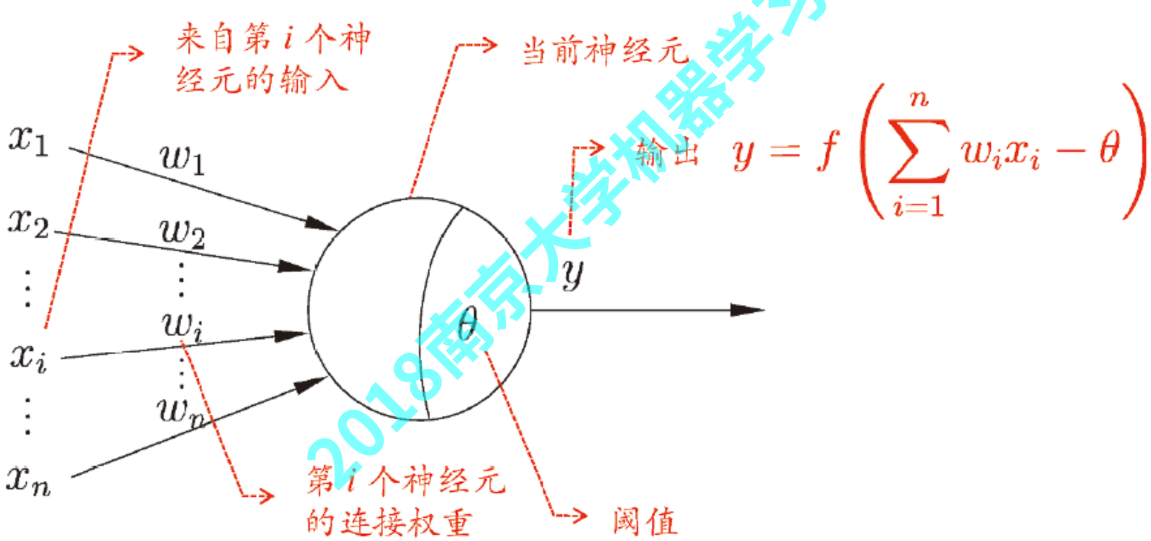
主讲教师：周志华

什么是神经网络？

neural networks are massively parallel interconnected networks of simple (usually adaptive) elements and their hierarchical organizations which are intended to interact with the objects of the real world in the same way as biological nervous systems do

[T. Kohonen, NN88]

M-P 神经元模型 [McCulloch and Pitts, 1943]

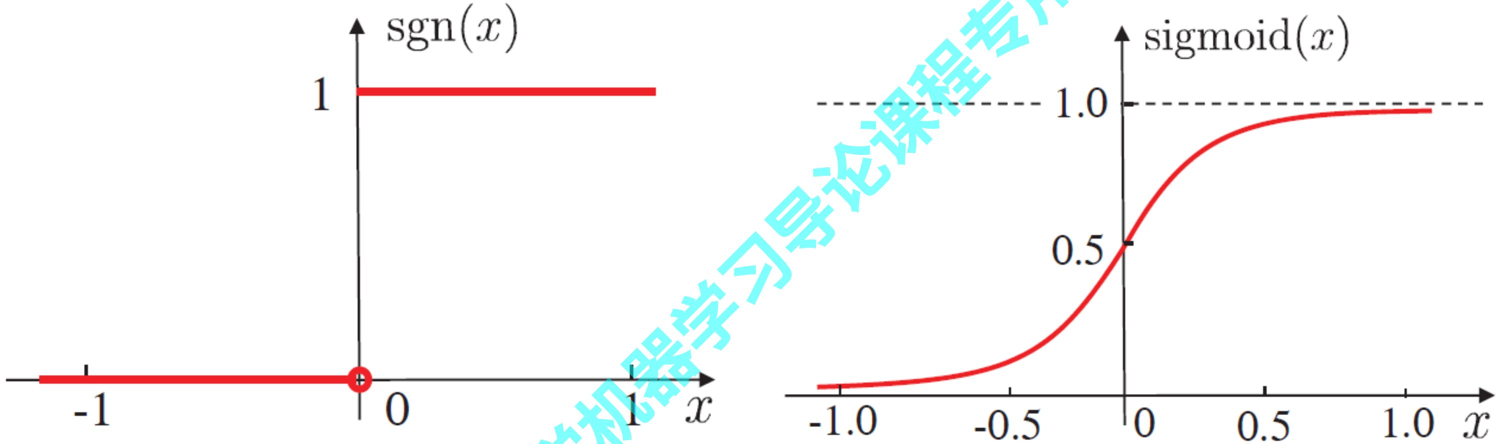


神经网络是一个很大的学科，本课程仅讨论它与机器学习的交集

神经网络学得的知识蕴含在连接权与阈值中

激活函数

- 理想激活函数是阶跃函数，0表示抑制神经元而1表示激活神经元
- 阶跃函数具有不连续、不光滑等不好的性质，常用的是 Sigmoid 函数



$$\operatorname{sgn}(x) = \begin{cases} 1, & \text{if } x \geq 0; \\ 0, & \text{if } x < 0. \end{cases}$$

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

(a) 阶跃函数　　(b) Sigmoid 函数

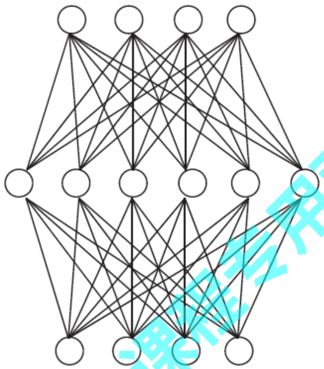
图 5.2　典型的神经元激活函数

多层前馈网络结构

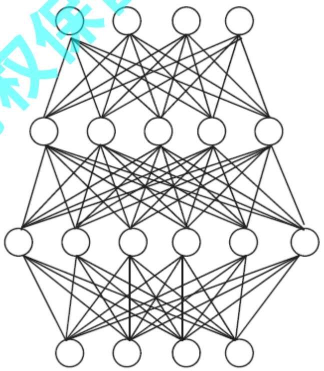
多层网络：包含隐层的网络

前馈网络：神经元之间不存在同层连接也不存在跨层连接

隐层和输出层神经元亦称“功能单元”(functional unit)



(a) 单隐层前馈网络



(b) 双隐层前馈网络

多层前馈网络有强大的表示能力

> 只需一个包含足够多神经元的隐层，多层前馈神经网络就能以任意精度逼近任意复杂度的连续函数 [Hornik et al., 1989]

但是，如何设置隐层神经元数是未决问题. 实际常用“试错法”

误差逆传播算法(BP)

最成功、最常用的神经网络算法，可被用于多种任务（不仅限于分类）

P. Werbos在博士学位论文中正式提出:

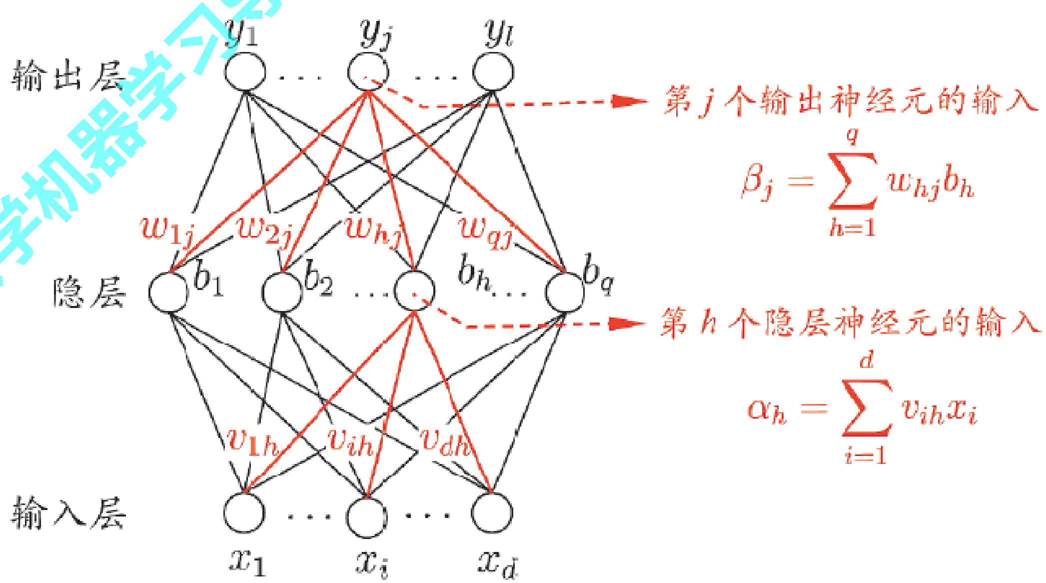
P. Werbos. Beyond regression: New tools for prediction and analysis in the behavioral science. Ph.D dissertation, Harvard University, 1974

给定训练集 $D = \{(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{y}_1), (\boldsymbol{x}_2, \boldsymbol{y}_2), \ldots, (\boldsymbol{x}_m, \boldsymbol{y}_m)\}, \boldsymbol{x}_i \in \mathbb{R}^d, \boldsymbol{y}_i \in \mathbb{R}^l$

输入：d 维特征向量
输出：l 个输出值

隐层：假定使用 q 个隐层神经元

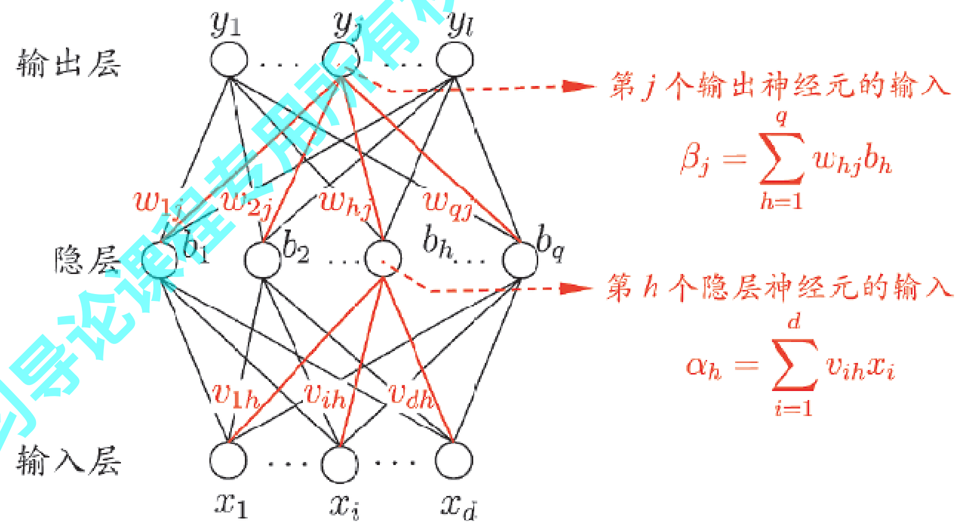
假定功能单元均使用 Sigmoid 函数



BP 算法推导

对于训练例 $(\boldsymbol{x}_k, \boldsymbol{y}_k)$, 假定网络的实际输出为 $\hat{\boldsymbol{y}}_k = (\hat{y}_1^k, \hat{y}_2^k, \ldots, \hat{y}_l^k)$

$$\hat{y}_j^k = f(\beta_j - \theta_j)$$



则网络在 $(\boldsymbol{x}_k, \boldsymbol{y}_k)$ 上的均方误差为：

$$E_k = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{l} (\hat{y}_j^k - y_j^k)^2$$

需通过学习确定的参数数目：$(d + l + 1)q + l$

BP 是一个迭代学习算法, 在迭代的每一轮中采用广义感知机学习规则

$$v \leftarrow v + \boxed{\triangle v}.$$

BP 算法推导 (续)

BP 算法基于**梯度下降**策略，以目标的负梯度方向对参数进行调整

$\boxed{\text{以 } w_{hj} \text{ 为例}}$

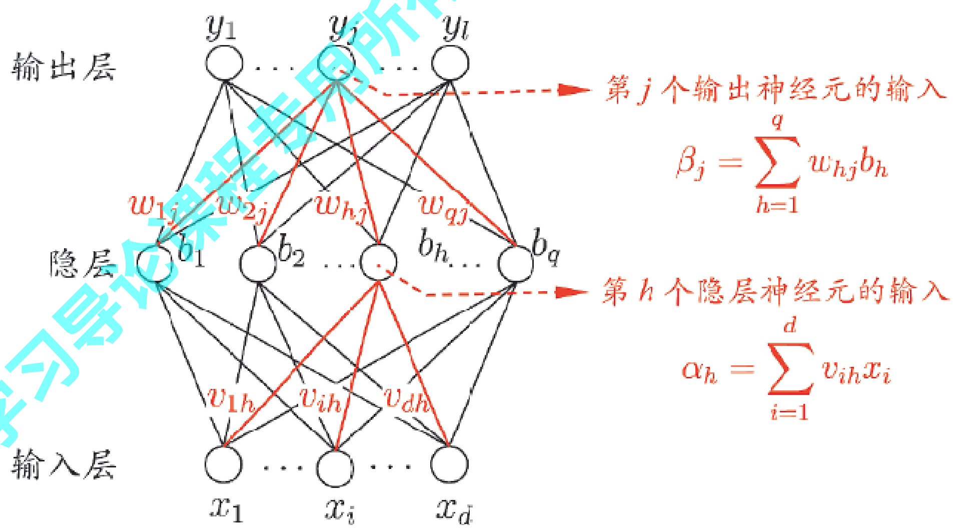
对误差 E_k，给定学习率 η，有：

$$\Delta w_{hj} = -\eta \frac{\partial E_k}{\partial w_{hj}}$$

注意到 w_{hj} 先影响到 β_j，

再影响到 $\hat{y}_j^k$，然后才影响到 E_k，有：

$$\frac{\partial E_k}{\partial w_{hj}} = \frac{\partial E_k}{\partial \hat{y}_j^k} \cdot \frac{\partial \hat{y}_j^k}{\partial \beta_j} \cdot \frac{\partial \beta_j}{\partial w_{hj}}$$

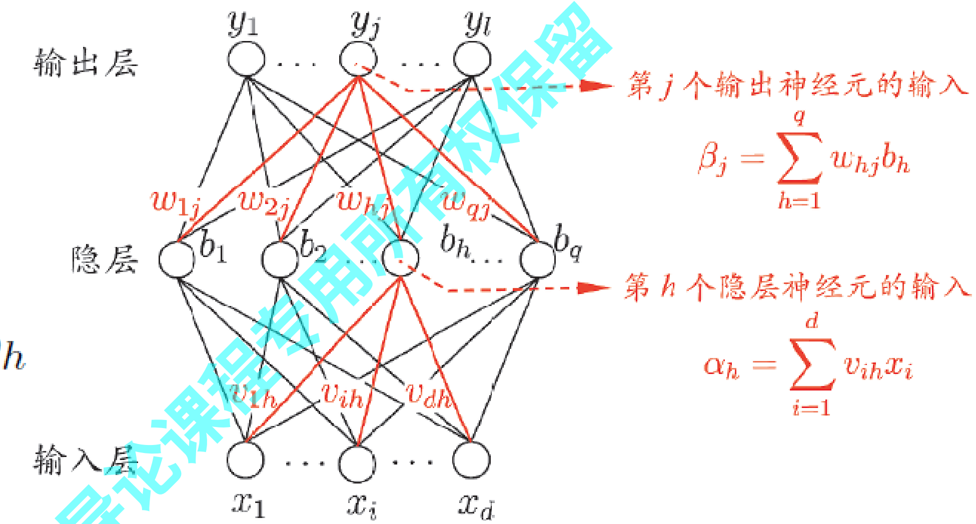


“链式法则”

BP 算法推导 (续)

$$\frac{\partial E_k}{\partial w_{hj}} = \boxed{\frac{\partial E_k}{\partial \hat{y}_j^k} \cdot \frac{\partial \hat{y}_j^k}{\partial \beta_j}} \cdot \boxed{\frac{\partial \beta_j}{\partial w_{hj}}}$$

$$= b_h$$



$$g_j = -\frac{\partial E_k}{\partial \hat{y}_j^k} \cdot \frac{\partial \hat{y}_j^k}{\partial \beta_j}$$

$$= -(\hat{y}_j^k - y_j^k) f'(\beta_j - \theta_j)$$

$$= \hat{y}_j^k (1 - \hat{y}_j^k)(y_j^k - \hat{y}_j^k) \ .$$

对 $\mathrm{sigmoid}(x) = \frac{1}{1+e^{-x}}$，有

$$f'(x) = f(x)(1 - f(x))$$

再注意到 $\hat{y}_j^k = f(\beta_j - \theta_j)$

于是，

$$\Delta w_{hj} = -\eta \frac{\partial E_k}{\partial w_{hj}} = \eta g_j b_h$$

BP 算法推导 (续)

类似地，有：

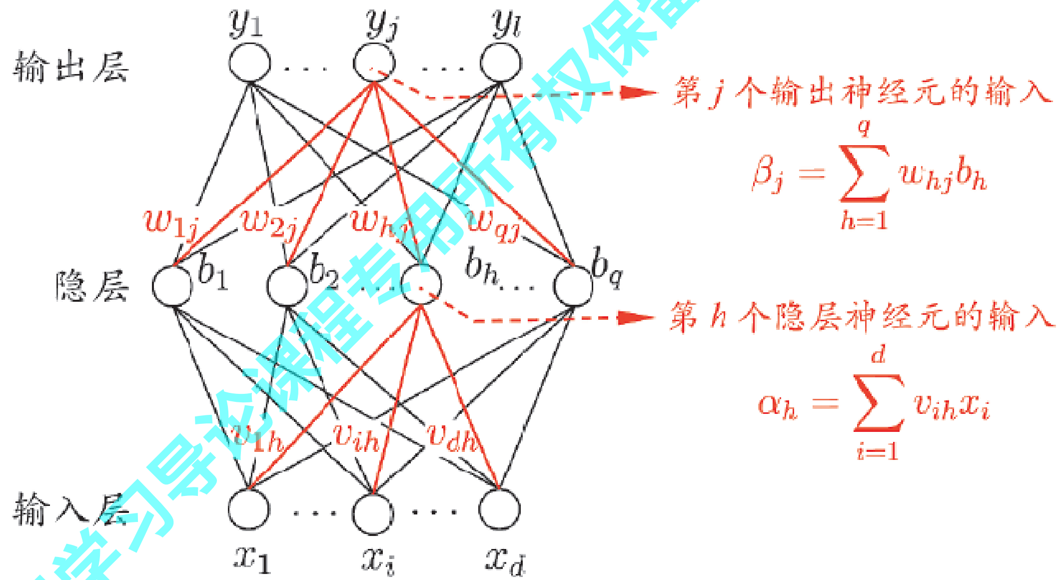
$$\Delta\theta_j = -\eta g_j$$

$$\Delta v_{ih} = \eta e_h x_i$$

$$\Delta\gamma_h = -\eta e_h$$

其中：

$$\begin{aligned} e_h &= -\frac{\partial E_k}{\partial b_h} \cdot \frac{\partial b_h}{\partial \alpha_h} \\ &= -\sum_{j=1}^{l} \frac{\partial E_k}{\partial \beta_j} \cdot \frac{\partial \beta_j}{\partial b_h} f'(\alpha_h - \gamma_h) = \sum_{j=1}^{l} w_{hj} g_j f'(\alpha_h - \gamma_h) \\ &= b_h(1 - b_h) \sum_{j=1}^{l} w_{hj} g_j \end{aligned}$$



学习率 $\eta \in (0,1)$ 不能太大、不能太小

BP 算法

输入： 训练集 $D=\{(\boldsymbol{x}_k,\boldsymbol{y}_k)\}_{k=1}^m$;
学习率 η.

过程：

```
在(0,1)范围内随机初始化网络中所有连接权和阈值
repeat
    for all (x_k, y_k) ∈ D do
        根据当前参数和式(5.3) 计算当前样本的输出 ŷ_k;
        根据式(5.10) 计算输出层神经元的梯度项 g_j;
        根据式(5.15) 计算隐层神经元的梯度项 e_h;
        根据式(5.11)-(5.14) 更新连接权 w_hj, v_ih 与阈值 θ_j, γ_h
    end for
until 达到停止条件
```

输出： 连接权与阈值确定的多层前馈神经网络

图 5.8 误差逆传播算法

标准 BP 算法 vs. 累积 BP 算法

标准 BP 算法

- 每次针对单个训练样例更新权值与阈值
- 参数更新频繁，不同样例可能抵消，需要多次迭代

累积 BP 算法

- 其优化目标是最小化整个训练集上的累计误差
- 读取整个训练集一遍才对参数进行更新，参数更新频率较低

在很多任务中，累计误差下降到一定程度后，进一步下降会非常缓慢，这时标准BP算法往往会获得较好的解，尤其当训练集非常大时效果更明显.

缓解过拟合

主要策略：

- 早停(early stopping)
  - 若训练误差连续 a 轮的变化小于 b，则停止训练
  - 使用验证集：若训练误差降低、验证误差升高，则停止训练

- 正则化 (regularization)
  - 在误差目标函数中增加一项描述网络复杂度

例如 $E = \lambda \frac{1}{m} \sum_{k=1}^{m} E_k + \underline{(1-\lambda) \sum_{i} w_i^2}$

偏好比较小的连接权和阈值，
使网络输出更“光滑”

To be continued