Week 3 written assignment

1 背景與動機:為何要用神經網路來近似多項式?

在深入探討這兩個 Lemma 之前,我們需要先理解作者為什麼要這麼做。

神經網路是由許多簡單的神經元所組成,而每個神經元通常會包含一個激活函數。 這篇論文的主角是 tanh,這是一個平滑的"S" 型曲線。整個神經網路的「表達能力」 在很大程度上取決於這個激活函數。

一個根本性的問題是:一個使用 tanh 活化函數的神經網路,究竟能用來做什麼? 它能準確地模仿或「近似」哪些複雜的數學函數?

根據數學上非常重要的定理:Weierstrass Approximation Theorem,任何一個在閉區間上的連續函數,都可以被一個多項式無限精確地近似。

這給了我們一個想法:

- 1. 如果我們能證明 tanh 神經網路可以精確地近似任何一個單項式 ,例如 x^2, x^3, x^p 等。
- 2. 那麼我們就能將這些單項式的近似組合起來,去近似任何一個多項式。
- 3. 這意味著 tanh 神經網路有潛力去近似任何一個連續函數。

因此, Lemma 3.1 和 3.2 正是這個證明中最關鍵的第一步: 證明 tanh 神經網路有能力建構出所有多項式的基本組成單位——單項式。

2 Lemma 3.1:建構奇數次方的單項式

白話解釋

對於任何奇數 s,我們可以建構一個只有一層隱藏層的 'tanh' 神經網路,這個網路可以無限精確地近似所有次方不高於 s 的奇數次單項式 (例如 x, x^3, \ldots, x^s)。不僅函數值本身可以做到無限接近,就連它的一階、二階 \ldots 等多階導數也能同時做到無限接近。

想法:利用微積分的「有限差分」

在微積分中,我們知道二階導數可以被「中央有限差分」來近似:

$$f''(x) \approx \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2}$$

這個公式的核心是透過對原始函數進行平移和加權求和,來得到其導數的近似值。更高階的導數也有類似的公式。

Lemma 3.1 的證明正是利用了這個概念,但目標不是求導數,而是反過來建構單項式:

- 1. 以 'tanh' 函數為基礎,一層隱藏層的神經網路所能做的事,就是對 'tanh' 函數進行平移、縮放和加權求和,例如: $c_1 \cdot \tanh(w_1x + b_1) + c_2 \cdot \tanh(w_2x + b_2) + \dots$ 。
- 2. 作者發現,如果將 'tanh' 函數本身代入到一個 p 階的有限差分公式中 (p 為奇數),並在 x=0 點進行計算,再經過適當的縮放,所得到的組合函數會非常接近單項式 y^p 。
- 3. 這個近似的誤差與參數 h(有限差分中的步長)的平方 h^2 成正比。意思是只要我們把 h 選得足夠小,就可以讓近似誤差變得任意小。而選擇不同的 h 值,對應到神經網路中就是調整 weight 和 bias。

總結來說,Lemma 3.1 告訴我們,僅僅透過對 'tanh' 函數進行平移和線性組合,就能「拼凑」出任何奇數次方的單項式,且精確度要多高有多高。

3 Lemma 3.2 解析:從奇數次方到偶數次方

白話解釋

我們可以建構一個只有一層隱藏層的 'tanh' 神經網路,這個網路可以無限精確地近似所有次方不高於某個奇數 s 的所有單項式(包含奇數和偶數次方)。

想法:遞迴式的代數技巧

直接用 Lemma 3.1 的方法來建構偶數次方的單項式會遇到一些技術困難。所以作者採用了另一個更聰明的策略:利用已知的奇數次方來遞迴地建構偶數次方。

這個策略的基礎是下面這個恆等式 (論文中的公式 (25)):

$$y^{2n} = \frac{1}{2\alpha(2n+1)} \left((y+\alpha)^{2n+1} - (y-\alpha)^{2n+1} - 2\sum_{k=0}^{n-1} {2n+1 \choose 2k} \alpha^{2(n-k)+1} y^{2k} \right)$$

這個公式看起來很複雜,但它的含義非常直觀:

一個「偶數次方」 (y^{2n}) 可以被表示成由兩個「奇數次方」 $((y+\alpha)^{2n+1})$ 和 $(y-\alpha)^{2n+1}$ 和一些「更低階的偶數次方」 $(y^{2k}, k < n)$ 組合而成。

這就提供了一個遞迴的建構方法:

- 1. 我們已經從 Lemma 3.1 知道如何用神經網路近似任何奇數次方了。
- 2. 第一步 (n=1): 我們想建構 y^2 。根據公式,我們需要 y^3 (奇數)和 y^0 (常數, 很簡單)的近似網路。我們都有,所以可以組合出 y^2 的近似網路。
- 3. 第二步 (n=2): 我們想建構 y^4 。根據公式,我們需要 y^5 (奇數)和 y^2, y^0 (更低階的偶數)的近似網路。我們也都有了,所以可以組合出 y^4 的近似網路。
- 4. 以此類推:我們可以一步步地建構出所有偶數次方的近似網路。

因為在建構過程中,我們需要用到對中心點在 $y \cdot y + \alpha$ 和 $y - \alpha$ 的函數進行近似,這意味著我們需要三組神經元。這也解釋了為什麼 Lemma 3.2 所需的神經網路寬度(神經元數量)大約是 Lemma 3.1 的三倍。

4 結論

Lemma 3.1 和 Lemma 3.2 證明了:

- Lemma 3.1:淺層 'tanh' 神經網路可以透過有限差分的思想,精確構造出奇數 次單項式。
- Lemma 3.2: 基於奇數次方的成果,可以再透過代數遞迴的方式,將構造能力 擴展到偶數次單項式。