

# 人工神经网络: 概述

**Æ** •AIPKU•

人工智能引论 主讲人: 刘家瑛



#### Research Group

#### STRUCT Group

智能影像计算

北京大学 王选计算机研究所

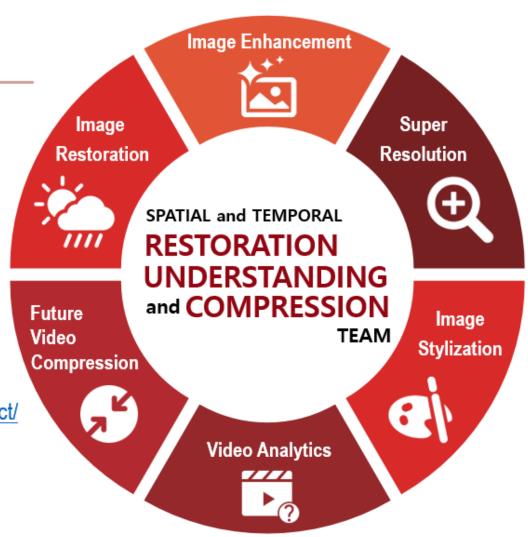
Spatial and Temporal Restoration, Understanding and Compression Team

• Pl: 刘家瑛

● 邮箱: <u>liujiaying@pku.edu.cn</u>

网页: <a href="http://www.wict.pku.edu.cn/struct/">http://www.wict.pku.edu.cn/struct/</a>







### 主要内容

- 什么是人工神经网络
   Artificial Neural Network, ANN
- 卷积神经网络
   Convolution Neural Network, CNN
- 循环神经网络
   Recurrent Neural Network, RNN
- 前沿: 超越CNN和RNN



## 主要内容

- · 什么是人工神经网络 (ANN)
- · 卷积神经网络(CNN)
- 循环神经网络(RNN)
- 前沿: 超越CNN和RNN





### 2018年图灵奖获得者

Three Pioneers is

Three Pioneers in Artificial
Intelligence Win Turing Award

The New Hork Times

- 'Godfathers of AI'
- Yann LeCun
- Geoffrey Hinton
- Yoshua Bengio







Source: https://www.nytimes.com/2019/03/27/technology/turing-award-hinton-lecun-bengio.html



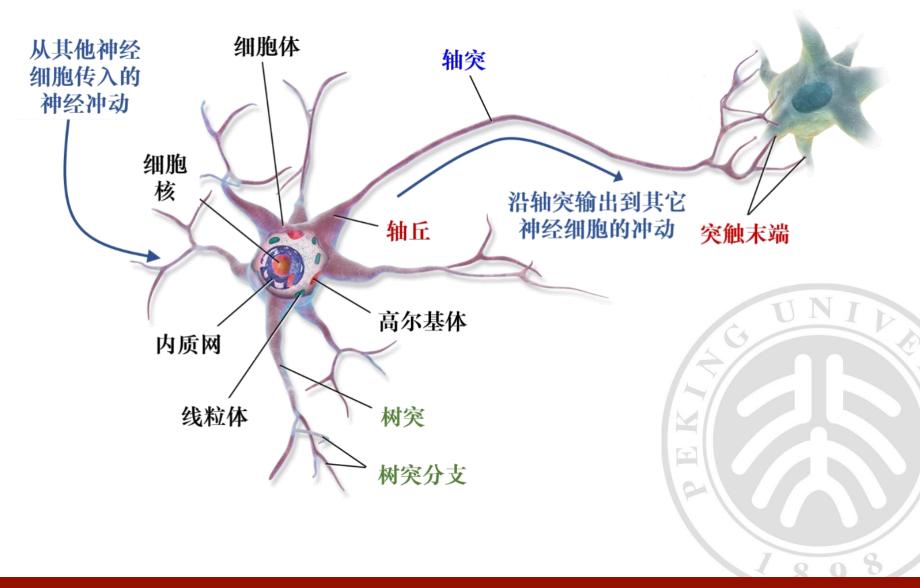
# \*\*·AIPKU·\*\*\* 什么是人工神经网络

- 生物学基础
- 感知机模型
- 激活函数
- 多层感知机模型
- 反向传播算法
- 损失函数





# 典型大脑皮层神经元结构





### 典型大脑皮层神经元结构

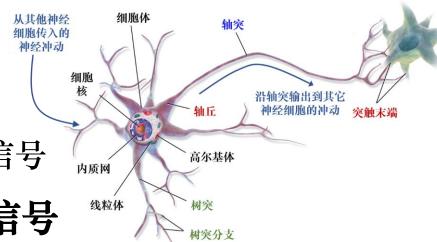
#### • 物理结构

- 轴突: 分支结构, 向外传输信号

- 树突: 从多个其它神经元接收信号

• 轴突和树突之间由突触传递信号

- 突触的神经递质释放引起下一个神经元 树突的电位变化







### 典型大脑皮层神经元结构

细胞体

神经细胞的冲动

高尔基体

细胞传入的 神经冲动

细胞

内质网

线粒体

### • 物理结构

- 轴突: 分支结构, 向外传输信号
- 树突: 从多个其它神经元接收信号
- 轴突和树突之间由突触传递信号
  - 突触的神经递质释放引起下一个神经元 树突的电位变化

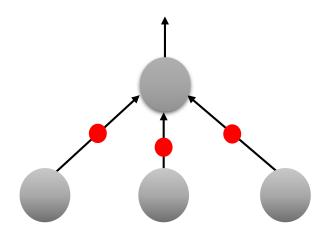
#### • 神经冲动的产生

- 轴突和细胞体的<mark>轴丘</mark>根据细胞接收和整合的电位 情况决定 → 是否产生神经冲动
- 神经冲动由轴突传递到其它神经元



### 抽象神经元模型: 大脑如何工作

- 每个神经元接收来自其它神经元的信号
  - 少数神经元的冲动信号来自于感受器
  - 大脑皮层神经元之间用神经冲动进行交流
- 传入信号对神经元电位的影响受到突触上"权值"的控制
  - 根据递质受体的不同, 可能有激活或者抑制





### 抽象神经元模型: 大脑如何工作

- 受体的"权值"会自动适应调整
- 神经元连接起来 → 实现有"计算任务"的神经元网络
  - 从认识物体, 到学习语言, 制定计划, 控制身体 ...
- 一个人类大脑大约包含 **10<sup>11</sup> 数量级**的神经元和 10<sup>15</sup> 数量级的突触连接 (权值)
  - 由于神经元数量十分庞大, 连接非常复杂, 大脑却可以在很短的时间响应一个任务?



### 大脑的模块化和分区结构

- •皮层的不同区域处理不同的任务
  - 现象: 脑部不同区域的损伤会导致不同机能丧失
  - 现象: 执行特定任务时观察到局部脑区血流量增加
- •大脑的不同区域在形态上是相似的
  - 现象: 幼年的脑部损伤时, 对应功能区会迁移到其它脑区



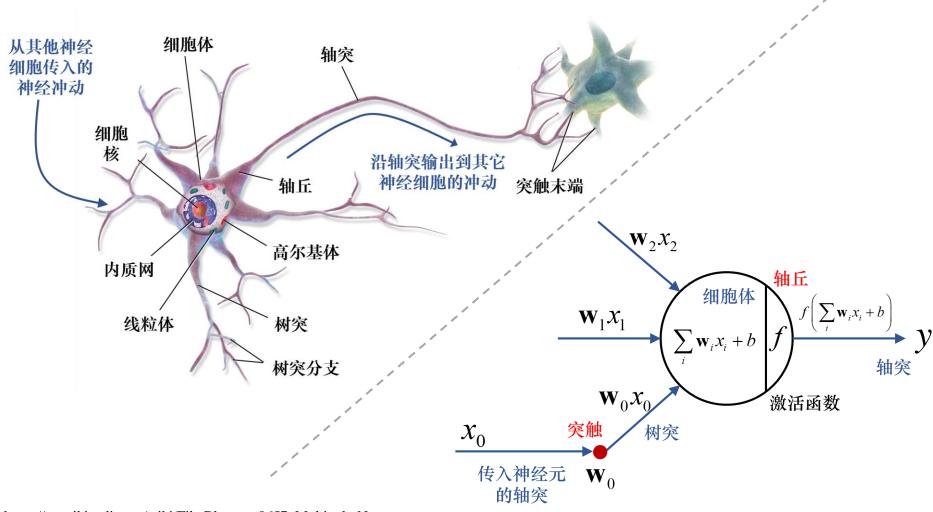
### 大脑的模块化和分区结构

- •皮质是由结构一致的神经细胞构成
  - 在脑部发育和学习/习得的过程中, 不同的脑区会被"训练" 成具有不同功能的"专用硬件"
  - 因此大脑能够同时实现 并行性 和 可塑性
  - 传统计算机可以通过程序设计, 实现并行性和可塑性
  - 近年, 有了更强大的中央处理器和更高并行的图形处理器 (GPU) → 计算机能够对大脑的神经元网络进行抽象的模拟



### 从生物结构到数学结构

• 对比神经元的生物结构和数学结构



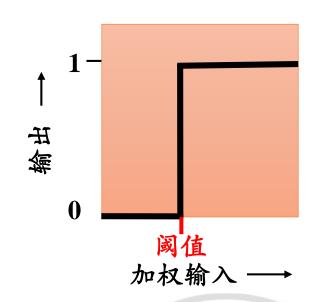
https://en.wikipedia.org/wiki/File:Blausen\_0657\_MultipolarNeuron.png



#### 二值神经元模型 McCulloch-Pitts [1943]

- 计算输入的加权和
- 如果加权和大于阈值,则输出一个固定 大小的神经冲动
- McCulloch 和 Pitts 认为,
  - 神经元 可以对一个命题进行真假判断
  - 多个神经元 整合各个命题真值 形成逻辑
- 该模型是实际情况的一种简化

例:实际中不同的神经元的激活强度可能是不一样的,在这里用 0-1 近似了





## ·AIPKU·II 神经元模型数学表达

- 二值神经元模型 可以用 线性方式表达
  - 不同的神经元的权值和阈值都可以不同

$$z = \sum_{i} x_{i} \mathbf{w}_{i}$$

$$y = \begin{cases} 1, & \text{if } z \ge \theta \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$$

$$z = b + \sum_{i} x_{i} \mathbf{w}_{i}$$

$$y = \begin{cases} 1, & \text{if } z \ge 0 \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$$

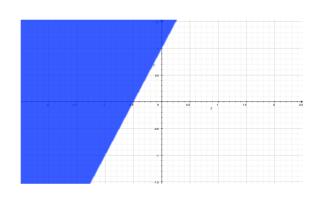
• 实质为 线性函数 结果的符号判断

阈值 
$$z=b+\sum_{i}x_{i}\mathbf{W}_{i}$$
 输出 对每个神经输入 进行加权求和

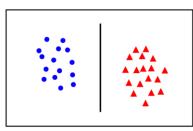


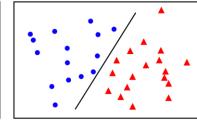
### 线性神经元 > 分类超平面

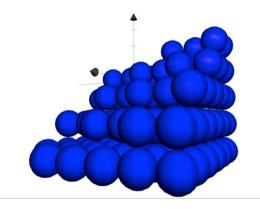
- •神经元 > 线性函数结果的正负号
  - 形式:  $f(\mathbf{x}) = \operatorname{sgn}(\mathbf{w}^{\mathsf{T}}\mathbf{x} + \mathbf{b})$
- 线性函数 > 分类超平面
  - 可分类线性可分的数据



$$2x - y + 1 < 0$$





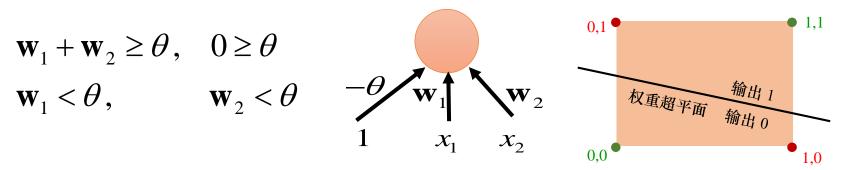


$$2x - y + 3z + 1 < 0$$



### 线性阈值神经元的局限

- 线性阈值神经元无法实现异或运算
- 异或运算真值表:  $(1,1) \to 1$ ;  $(0,0) \to 1$  $(1,0) \to 0$ ;  $(0,1) \to 0$
- 将真值表代入神经元表达式, 得到的方程无解



- 由于多个线性矩阵运算总是可以合并为一个矩阵运算,多个神经元的组合无法得到高于单个神经元的表达能力
- 解决方案: 非线性激活函数和隐藏层



### 非线性激活函数: Sigmoid

- 单调函数: 不同的神经元可以有不同的响应强度
- 可导: 可以使用梯度方法进行训练
- 非线性: 为模型提供非线性建模能力
- 响应曲线与二值模型和生物模型相似

$$z = b + \sum_{i} x_{i} \mathbf{w}_{i}$$

$$y = \frac{1}{1 + e^{-z}}$$

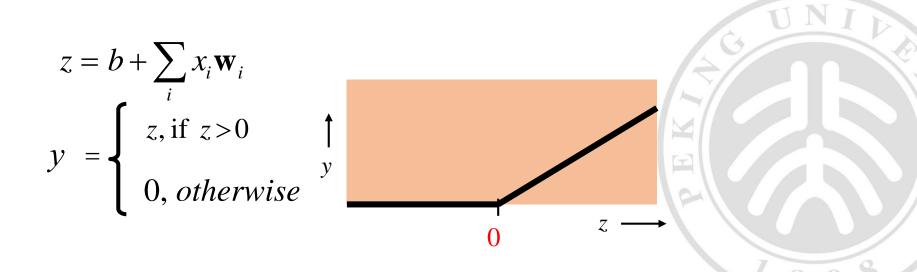
$$0.5 - \frac{1}{0}$$

$$z \rightarrow$$



### 非线性激活函数:整流线性模型 ReLU

- 更简单的非线性神经元设计
  - 生物神经元存在"激活"和"抑制"
  - 数学模型中, 负值与正值对称, 无法表达"抑制"
  - 在线性神经元中引入整流机制, 使得负响应被"抑制"
  - 满足激活函数的要求, 并且计算更加简单

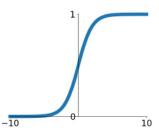




### 非线性激活函数

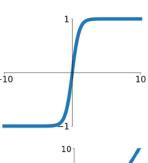
#### **Sigmoid**

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



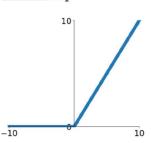
#### tanh

tanh(x)



#### ReLU

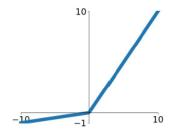
 $\max(0, x)$ 



### ReLU在大多数问题中 都是较好的默认选择

#### Leaky ReLU

 $\max(0.1x, x)$ 

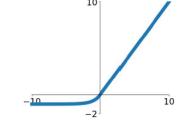


#### **Maxout**

$$\max(w_1^T x + b_1, w_2^T x + b_2)$$

#### **ELU**

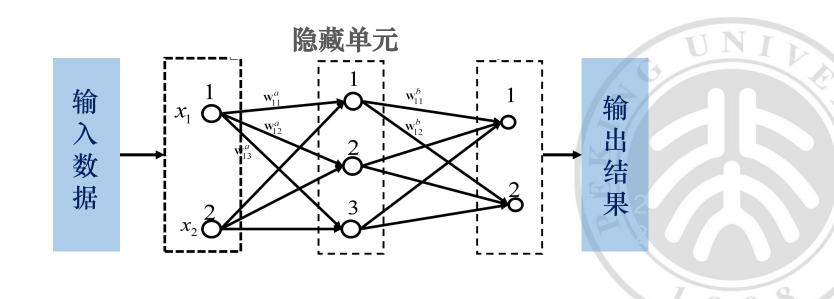
$$\begin{cases} x & x \ge 0 \\ \alpha(e^x - 1) & x < 0 \end{cases}$$





### 多层结构与隐藏单元

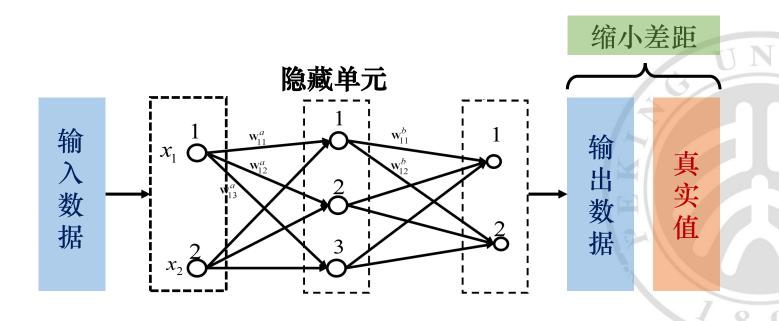
- 包含隐藏单元的多组神经元组成 神经元网络
- 输入与输出神经元之外的神经元被称为隐藏单元
- 模拟大脑的多层神经元结构能够带来增强的建模能力
- 线性神经元计算结果经过激活函数产生输出





### 多层结构与隐藏单元

- •但是需要解决以下问题:
  - 单个神经元可以使用梯度优化的算法进行训练
  - 隐藏神经元没有明确的输出目标, 无法直接训练
  - 多层神经元需要有效的训练算法





### 训练与最优化

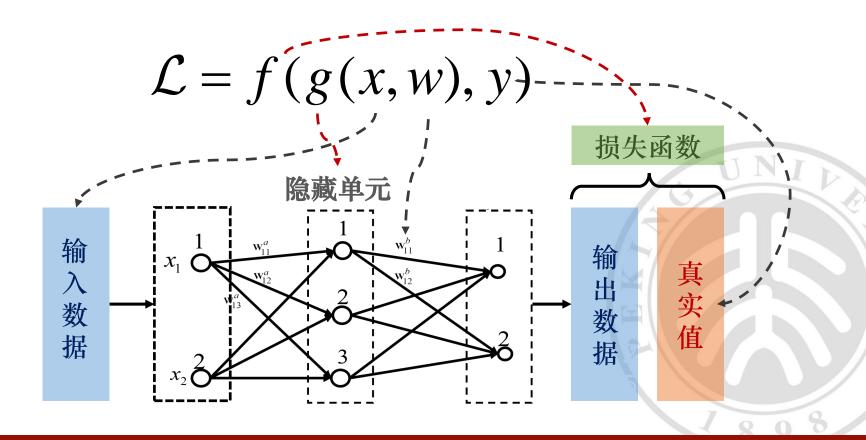
- 将问题表达为最优化形式
  - 给定一组数据作为训练数据
  - 神经元网络中神经元的权值和阈值为待确定的参数
- 最小化神经元网络预测的"误差"
  - 将"误差"表达为损失函数
  - 损失函数取值越小, 网络的预测越准确





## 多层结构与隐藏单元

- 将损失函数表达成关于数据和参数的复合函数
- 调整参数 w, 使损失函数值最小化, 即最小化误差

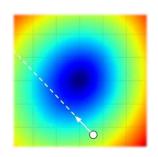




### ·AIPKU· 量 最优化: 梯度方法

- 梯度
  - 目标函数关于各参数偏导数构成的向量
  - 负梯度方向是函数值在该点下降最"陡"的方向

$$rac{df(x)}{dx} = \lim_{h o 0} rac{f(x+h) - f(x)}{h}$$



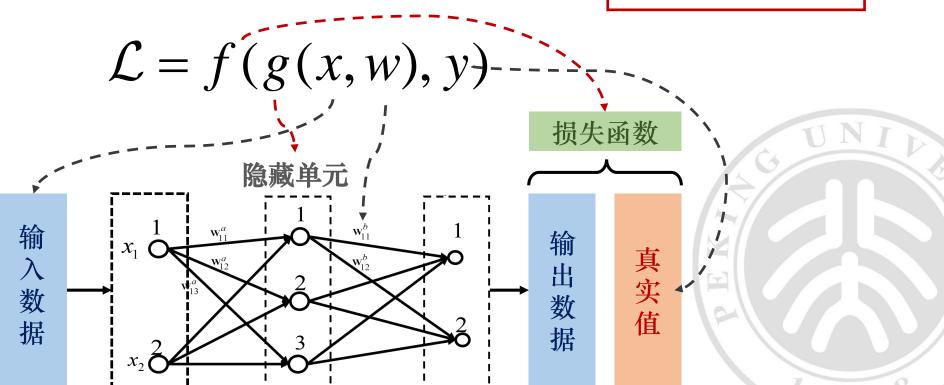
- 梯度下降
  - 参数量大, 无法得出闭式解, 因此用数值迭代方法
  - 沿着负梯度方向多次调整参数, 降低目标函数值
- 随机梯度下降
  - 求解时从训练数据中随机选取一定的样本进行迭代
  - 节约计算资源, 同时减少陷入局部最优的风险



## 多层结构与隐藏单元

• 计算损失函数在输入为某一 x, y, w 取值时关于 w 的梯度

$$\left. \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial w} \right) \right|_{x=x_0, w=w_0, y=y_0}$$





## 复合函数的求导

• 假设一个复合函数

$$f(x, y, w) = (x + y)w$$

• 现在为了训练其中的参数, 需要求函数值关于其中各个参数的梯度

$$q = x + y \rightarrow \frac{\partial q}{\partial x} = 1, \quad \frac{\partial q}{\partial y} = 1 \qquad f = qw \rightarrow \frac{\partial f}{\partial q} = w, \quad \frac{\partial f}{\partial w} = q$$

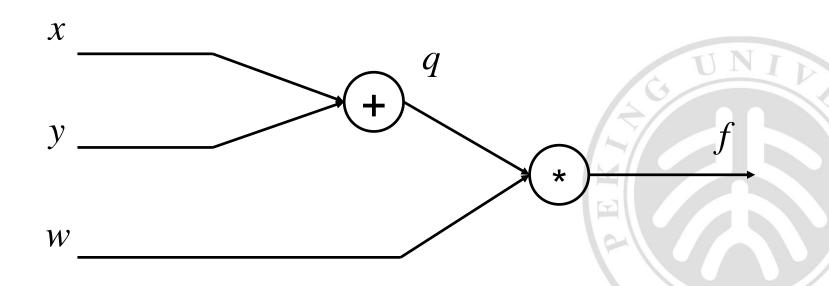
• 应用 链式法则 可得所需梯度



# ■ **AIPKU**· **夏合函数的求导**

$$f(x, y, w) = (x + y)w q = x + y \rightarrow \frac{\partial q}{\partial x} = 1, \frac{\partial q}{\partial y} = 1$$

$$x = -2, y = 5, w = -4 f = qw \rightarrow \frac{\partial f}{\partial q} = w, \frac{\partial f}{\partial w} = q$$

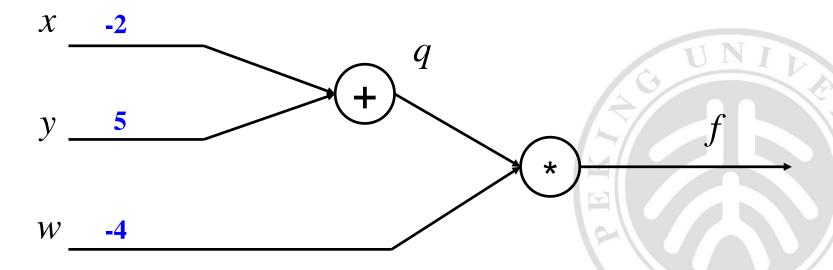




# ■ **AIPKU 夏合函数的求导**

$$f(x, y, w) = (x + y)w$$

$$q = x + y \rightarrow \frac{\partial q}{\partial x} = 1, \quad \frac{\partial q}{\partial y} = 1 \qquad f = qw \rightarrow \frac{\partial f}{\partial q} = w, \quad \frac{\partial f}{\partial w} = q$$

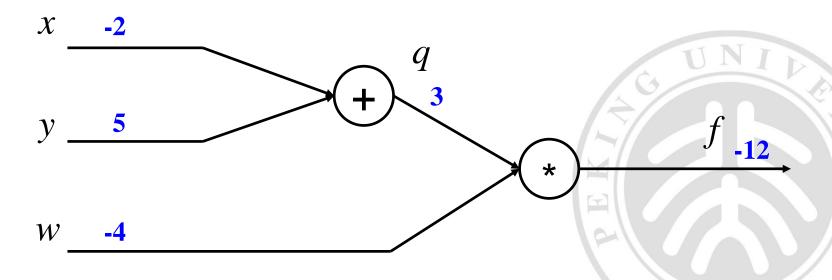




# ■ **AIPKU 夏合函数的求导**

$$f(x, y, w) = (x + y)w$$

$$q = x + y \rightarrow \frac{\partial q}{\partial x} = 1, \quad \frac{\partial q}{\partial y} = 1 \qquad f = qw \rightarrow \frac{\partial f}{\partial q} = w, \quad \frac{\partial f}{\partial w} = q$$

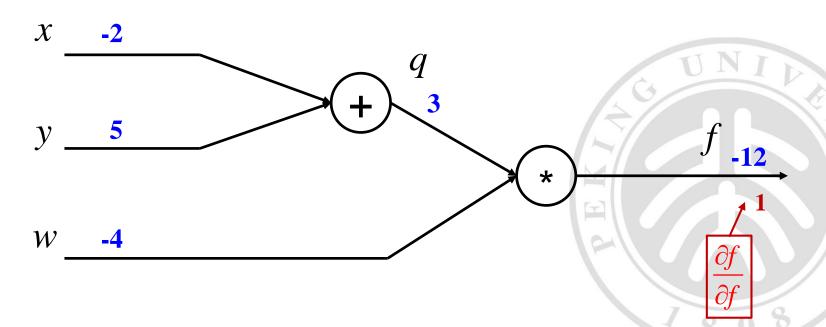




# ■ **AIPKU**· **复合函数的求导**

$$f(x, y, w) = (x + y)w$$

$$q = x + y \rightarrow \frac{\partial q}{\partial x} = 1, \quad \frac{\partial q}{\partial y} = 1 \qquad f = qw \rightarrow \frac{\partial f}{\partial q} = w, \quad \frac{\partial f}{\partial w} = q$$

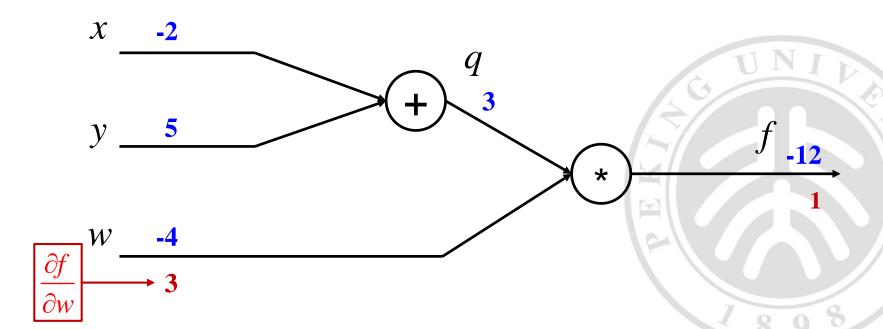




# II AIPKU I 复合函数的求导

$$f(x, y, w) = (x + y)w$$

$$q = x + y \rightarrow \frac{\partial q}{\partial x} = 1, \quad \frac{\partial q}{\partial y} = 1 \qquad f = qw \rightarrow \frac{\partial f}{\partial q} = w, \quad \frac{\partial f}{\partial w} = q$$

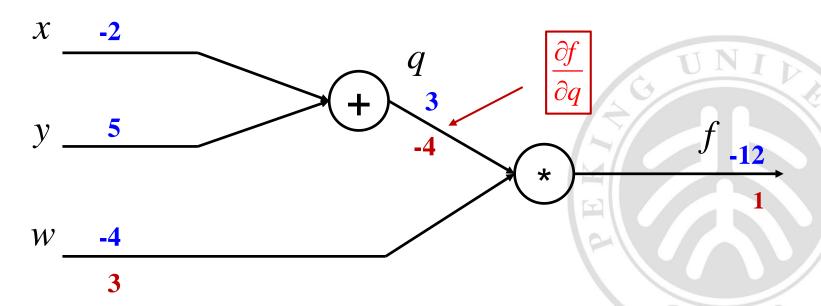




# ■ **「AIPKU」 复合函数的求导**

$$f(x, y, w) = (x + y)w$$

$$q = x + y \rightarrow \frac{\partial q}{\partial x} = 1, \quad \frac{\partial q}{\partial y} = 1 \qquad f = qw \rightarrow \frac{\partial f}{\partial q} = w, \quad \frac{\partial f}{\partial w} = q$$





# ·AIPKU· 量 复合函数的求导

$$f(x, y, w) = (x + y)w$$

$$q = x + y \rightarrow \frac{\partial q}{\partial x} = 1, \quad \frac{\partial q}{\partial y} = 1 \qquad f = qw \rightarrow \frac{\partial f}{\partial q} = w, \quad \frac{\partial f}{\partial w} = q$$

$$x \rightarrow \frac{2}{\sqrt{2}} \qquad q \qquad \frac{\partial f}{\partial x} = \frac{\partial f}{\partial q} \cdot \frac{\partial q}{\partial x} = w \cdot 1$$

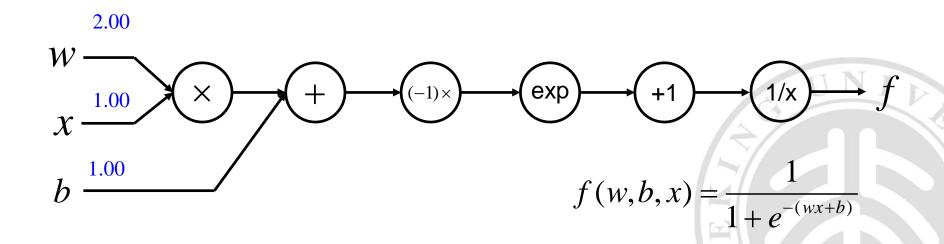
$$y \rightarrow \frac{\partial f}{\partial y} \qquad w \rightarrow \frac{\partial f}{\partial y} = \frac{\partial f}{\partial q} \cdot \frac{\partial q}{\partial y} = w \cdot 1$$

$$\frac{\partial f}{\partial y} = \frac{\partial f}{\partial q} \cdot \frac{\partial q}{\partial y} = w \cdot 1$$



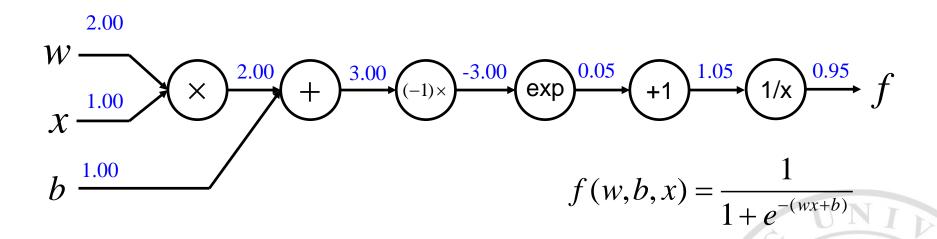
## 复合函数的求导

- 一个稍微复杂的例子
  - 假设关于输入 x 和参数 w, b 的函数
  - 求函数关于 x, w, b 的偏导数  $\left(\frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f}{\partial w}, \frac{\partial f}{\partial b}\right)\Big|_{x=1, w=2, b=1}$



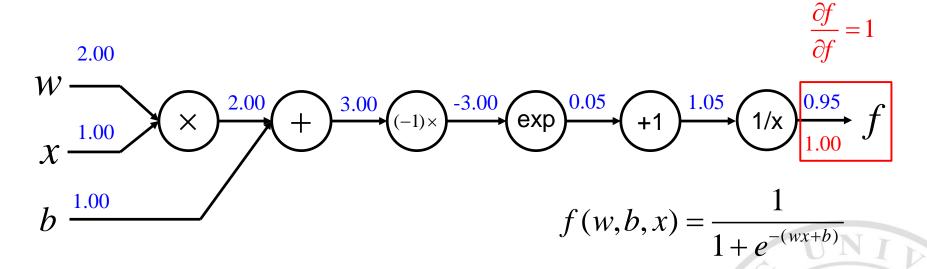


• 给定输入, 计算各节点输出



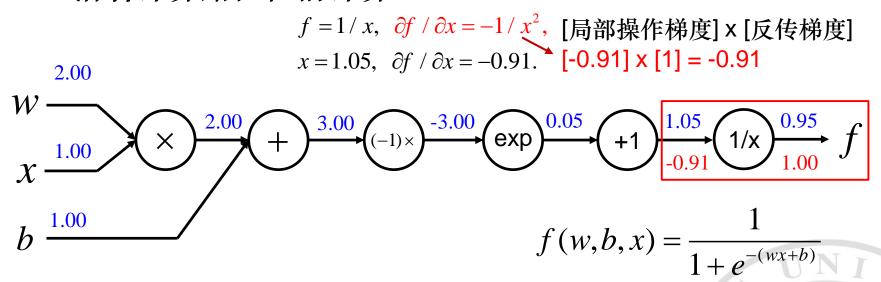


• 从后往前, 最后一步偏导始终为1





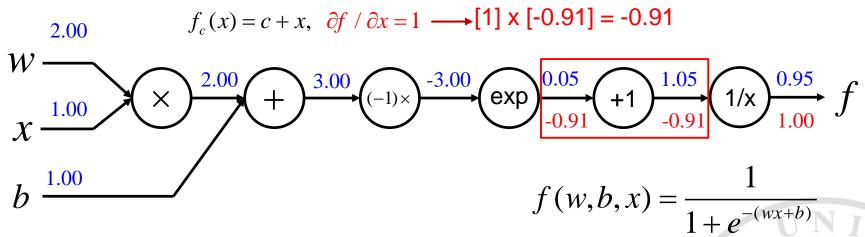
• 沿着计算路径往前计算





• 沿着计算路径往前计算

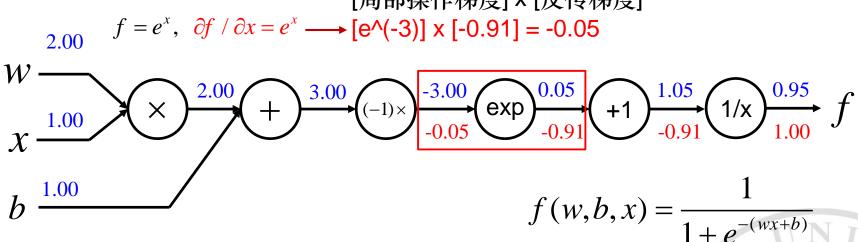
[局部操作梯度] x [反传梯度]





• 沿着计算路径往前计算

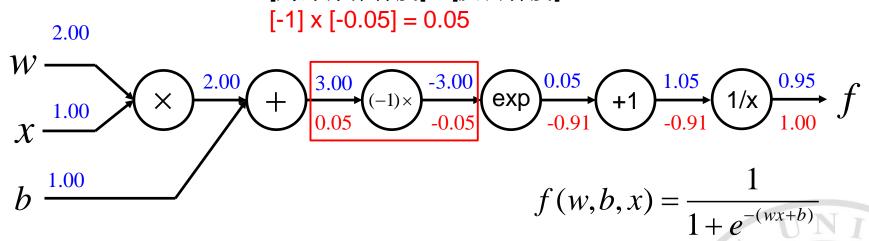
[局部操作梯度] x [反传梯度]





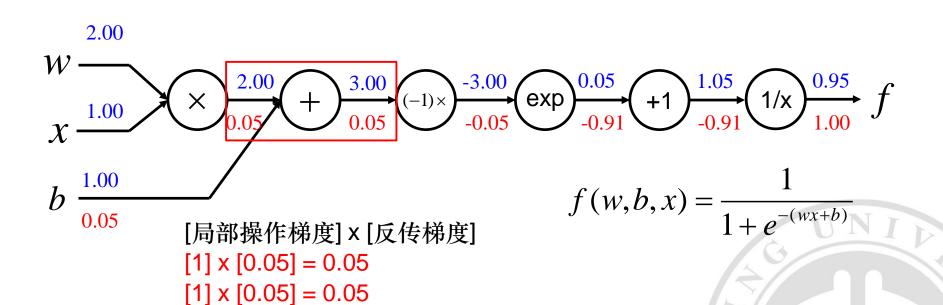
• 沿着计算路径往前计算

[局部操作梯度] x [反传梯度]



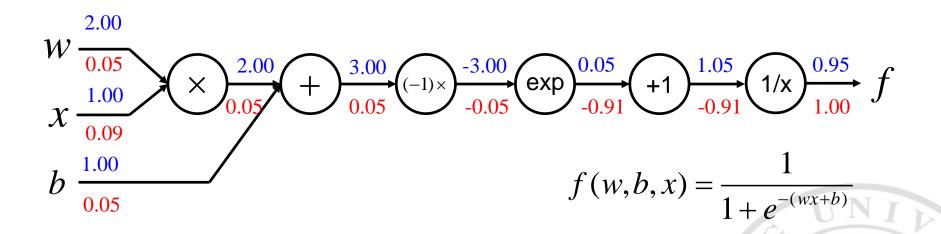


• 沿着计算路径往前计算





• 最终到达输入节点, 获得梯度



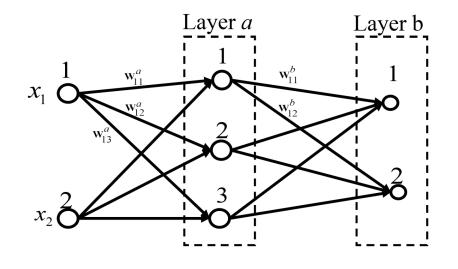


#### 多层神经元的训练

• 链式求导法则

$$\frac{\partial g(f(x,y))}{\partial x} = \frac{\partial g}{\partial f} \frac{\partial f}{\partial x}$$

• 神经元网络可以表达为一个复合函数



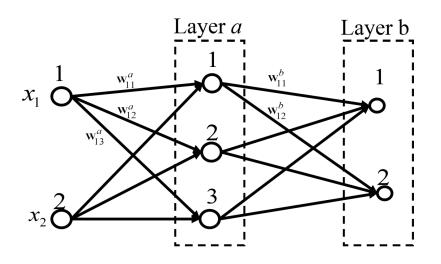
$$y_{j}^{a} = \sum_{i} \mathbf{W}_{ij}^{a} \cdot x_{i} + b_{j}^{a}, \quad j = 1, 2, 3$$

$$\sigma(x) = \frac{1}{1 + e^{(-x)}}, \quad z_{j}^{a} = \sigma(y_{j}^{a})$$

$$y_{j}^{b} = \sum_{i} \mathbf{W}_{ij}^{b} \cdot z_{i}^{a} + b_{j}^{b}, \quad j = 1, 2$$



• 假设一个 2层 的神经元网络



$$y_j^a = \sum_i \mathbf{W}_{ij}^a \cdot x_i + b_j^a, \quad j = 1, 2, 3$$

$$\sigma(x) = \frac{1}{1 + e^{(-x)}}, \quad z_j^a = \sigma(y_j^a)$$

$$y_{j}^{b} = \sum_{i} \mathbf{W}_{ij}^{b} \cdot z_{i}^{a} + b_{j}^{b}, \quad j = 1, 2$$

- 假设输入  $x_1 = 1, x_2 = 1$  , 目标值  $Y_1 = 0, Y_2 = 1$
- 损失函数MSE  $\mathcal{L} = \frac{1}{2}[(y_1^b Y_1)^2 + (y_2^b Y_2)^2]$
- 如何计算各个权重的梯度, 实现网络的训练?



●步骤一: 随机给定权值参数的初始值

$\mathbf{W}_{ij}^{a}$
-----------------------

	<b>j</b> =1	<b>j</b> =2	<b>j</b> =3
i=1	1	0.5	2
i=2	-1	0.5	3

 $\mathbf{W}_{ij}^{b}$ 

	<b>j</b> =1	<b>j</b> =2
i=1	1	2
i=2	1	3
i=3	-1	-2

 $b_j^a$ 

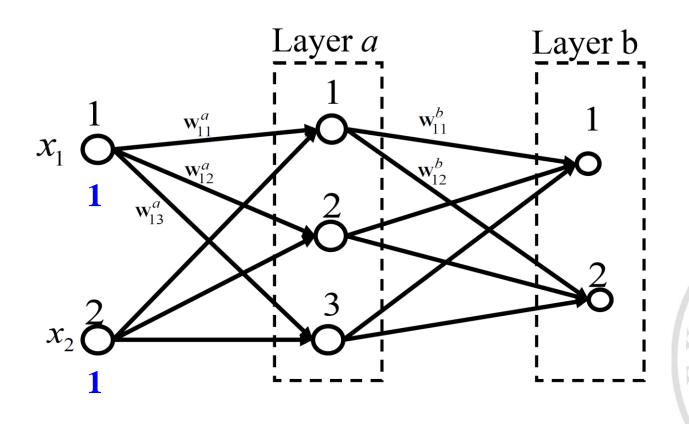
$\mathbf{j} = 1$	$\mathbf{j}=2$	j = 3
0	2	-2

 $b_j^b$ 

j = 1	j=2
1	-1

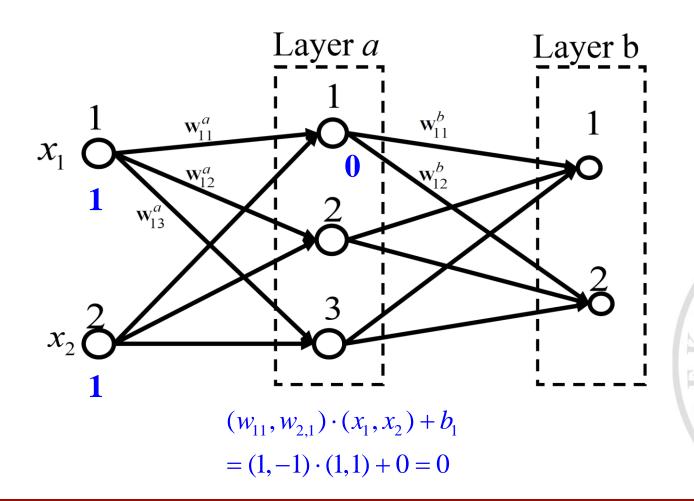


●步骤二: 计算当前网络的预测输出值



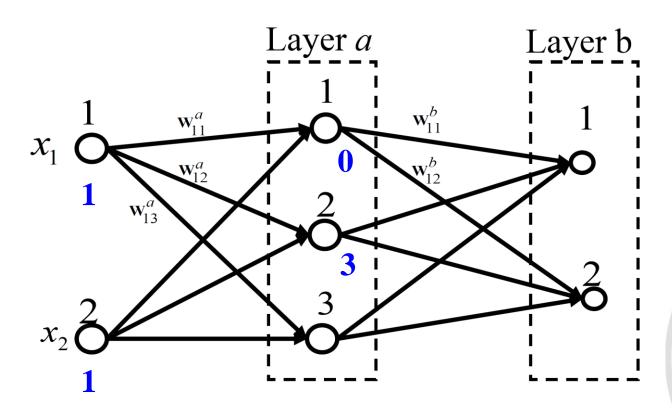


●步骤二: 计算当前网络的预测输出值





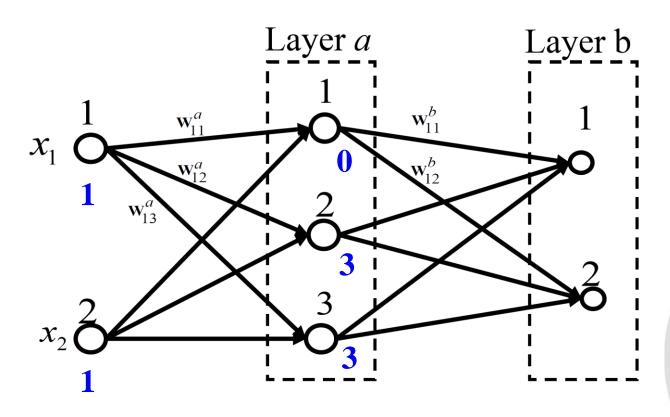
●步骤二: 计算当前网络的预测输出值



 $(0.5, 0.5) \cdot (1,1) + 2 = 3$ 



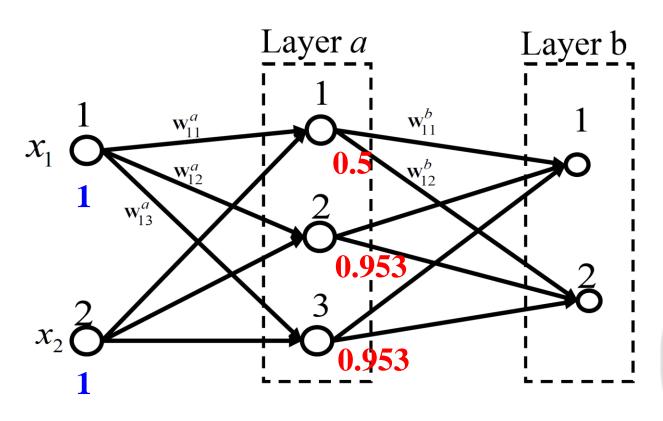
●步骤二: 计算当前网络的预测输出值



$$(2,3) \cdot (1,1) + (-2) = 3$$



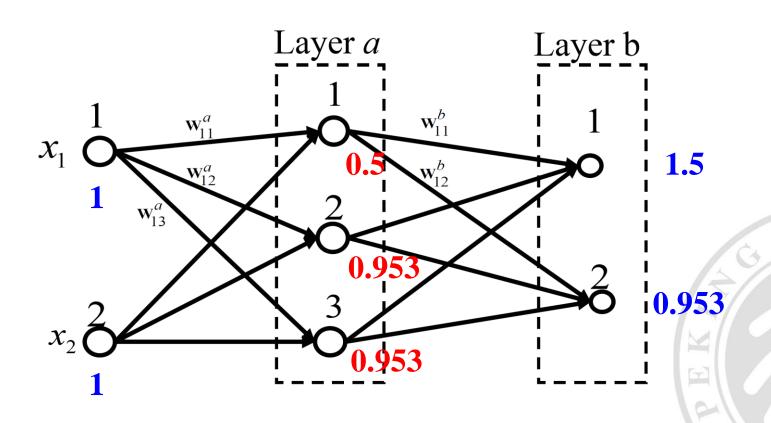
•步骤二: 计算当前网络的预测输出值



$$\mathbf{z}^a = \sigma(\mathbf{y}^a) = (0.5, 0.953, 0.953)$$

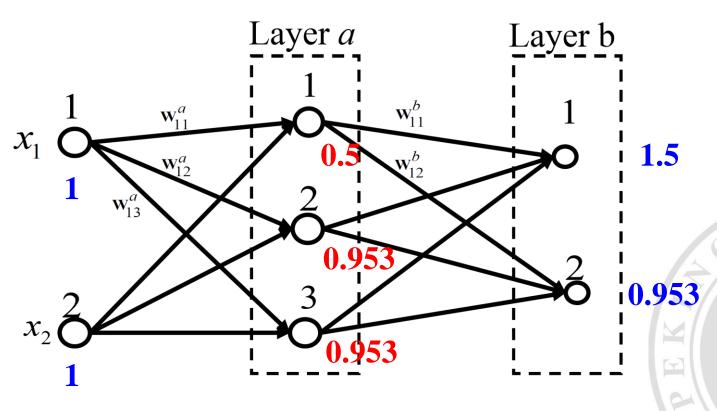


●步骤二: 计算当前网络的预测输出值





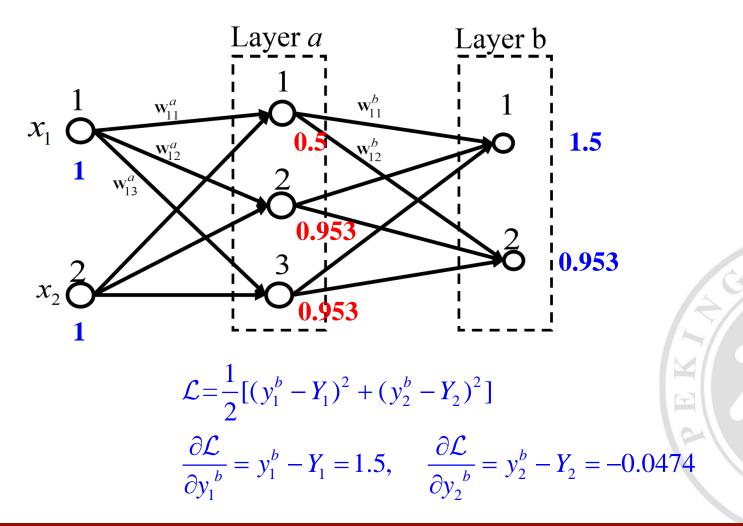
●步骤三: 计算损失函数值



$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} [(y_1^b - Y_1)^2 + (y_2^b - Y_2)^2] = \frac{1}{2} [(1.5 - 0)^2 + (0.953 - 1)^2] = 1.126$$



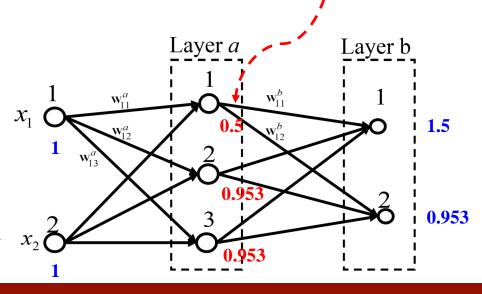
●步骤四: 梯度计算和反向传播 (Back Propagation)





### ·AIPKU· 多层神经元的训练: 例子

· 步骤四: 梯度计算和反向传播 (Back Propagation)

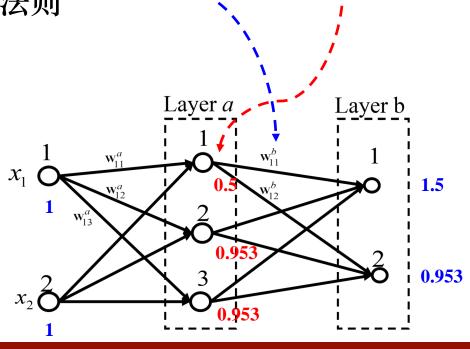




- · 步骤四: 梯度计算和反向传播 (Back Propagation)
  - 我们现在得到了 Loss 关于第二层各个参数的梯度
  - 接下来计算关于 z<sup>a</sup> 的梯度 > 以便继续反传
  - Loss 是 两个分别关于  $y_1^b$  和  $y_2^b$  的 复合函数  $z_1^a$
  - 根据多元复合函数求导法则

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial z_1^a} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial y_1^b} \frac{\partial y_1^b}{\partial z_1^a} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial y_2^b} \frac{\partial y_2^b}{\partial z_1^a} 
= \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial y_1^b} w_{11}^b + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial y_2^b} w_{12}^b$$

- 计算得到梯度  $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial z_1^a}$ 



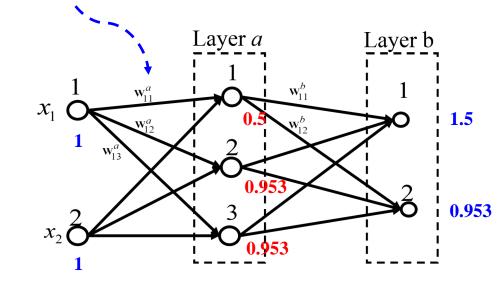


- · 步骤四: 梯度计算和反向传播 (Back Propagation)
  - 现在获得了 Loss 关于第一层输出的梯度  $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial z_1^a}$
  - 接下来计算

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial y_1^a} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial z_1^a} \frac{\partial z_1^a}{\partial y_1^a}$$

$$\frac{\partial z_1^a}{\partial y_1^a} = \frac{\partial \frac{1}{1 + e^{(-y_1^a)}}}{\partial y_1^a}$$

$$= -\frac{1}{[1 + e^{(-y_1^a)}]^2} \cdot [-e^{(-y_1^a)}]$$

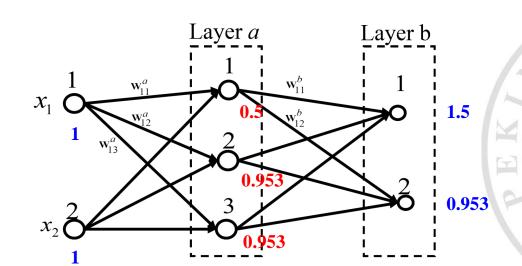


$$= (z_1^a)^2 \cdot e^{(-y_1^a)}$$
$$= (0.5)^2 \times 1$$

 $y_1^a$  和  $z_1^a$  在前传过程中均可暂存下来



- ●步骤四: 梯度计算和反向传播 (Back Propagation)
  - 现在得到了 $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial y_1^a}$
  - 与前一层  $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial y_1^b}$  形式一致
  - 接下来可以采用同样的方式得到其它的梯度值

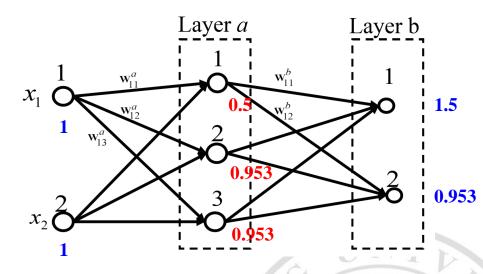




●步骤四: 梯度计算和反向传播 (Back Propagation)

$$\frac{\partial g(f(x,y))}{\partial x} = \frac{\partial g}{\partial f} \frac{\partial f}{\partial x}$$

网络总可以写成 复合函数 复合函数的每个部分均可导



故可对函数应用链式法则

实际中前向传播和反向传播均可写成矩阵形式



●步骤四: 梯度计算和反向传播 (Back Propagation)

$\partial \mathcal{L}$	
$\partial \mathbf{W}_{ij}^{a}$	

	$\mathbf{j} = 1$	$\mathbf{j} = 2$	j = 3
i = 1	0.3513	0.0613	-0.0635
i = 2	0.3513	0.0613	-0.0635

 $rac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{W}_{ij}^b}$ 

	j = 1	j = 2
i = 1	0.75	-0.0237
i = 2	1.4289	-0.0452
i = 3	1.4289	-0.0452

$$rac{\partial \mathcal{L}}{\partial b^a_j}$$

j = 1	j = 2	j = 3
0.3513	0.0613	-0.0634

$\partial \mathcal{L}$	j = 1	j = 2
$\partial b_j^b$	1.5	-0.0474



●步骤五: 按照一定的学习率 (步长) 更新参数

$$\mathbf{W} = \mathbf{W} - \eta \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{W}}$$
, assume  $\eta = 0.1$ 

		$\mathbf{j} = 1$	$\mathbf{j} = 2$	j = 3
$\mathbf{\hat{W}}^{a}_{ij}$	i = 1	0.965	0.494	2.006
	i = 2	-1.035	0.494	3.006

		$\mathbf{j} = 1$	j = 2
$\hat{\mathbf{W}}^b_{ij}$	i = 1	0.925	2.002
$\mathbf{v}\mathbf{v}_{ij}$	i = 2	0.857	3.005
	i = 3	-1.143	-1.995

^ a	j = 1	j = 2	j = 3	$\hat{m{h}}^{\;b}$	j = 1	j = 2
$b_j^{\ a}$	-0.035	1.994	-1.994	$ u_j $	0.85	-0.995

$$\hat{\mathcal{L}} = \frac{1}{2} [(y_1^b - Y_1)^2 + (y_2^b - Y_2)^2] = \frac{1}{2} [(1.014 - 0)^2 + (0.910 - 1)^2] = 0.518 \downarrow$$





#### 神经网络的训练

- 随机初始化网络中的权值
- 计算当前网络的预测输出值 (前向传播)
- 计算 损失函数 值
- 计算损失函数值关于各权值的梯度(反向传播)
- 按照一定的学习率更新参数





#### 神经网络的训练

- 随机初始化网络中的权值
- 计算当前网络的预测输出值 (前向传播)
- 计算 损失函数 值
- 计算损失函数值关于各权值的梯度(反向传播)
- 按照一定的学习率更新参数

为了使得网络能够满足需求,需要选择合适的损失函数



#### 人工神经网络 — 小结

- 多层神经元组成神经元网络
- 能够拟合多种函数
- 损失函数表达神经网络训练的目标
- 随机梯度下降法求解关于参数的最优化问题
- 反向传播算法计算多层参数的梯度

