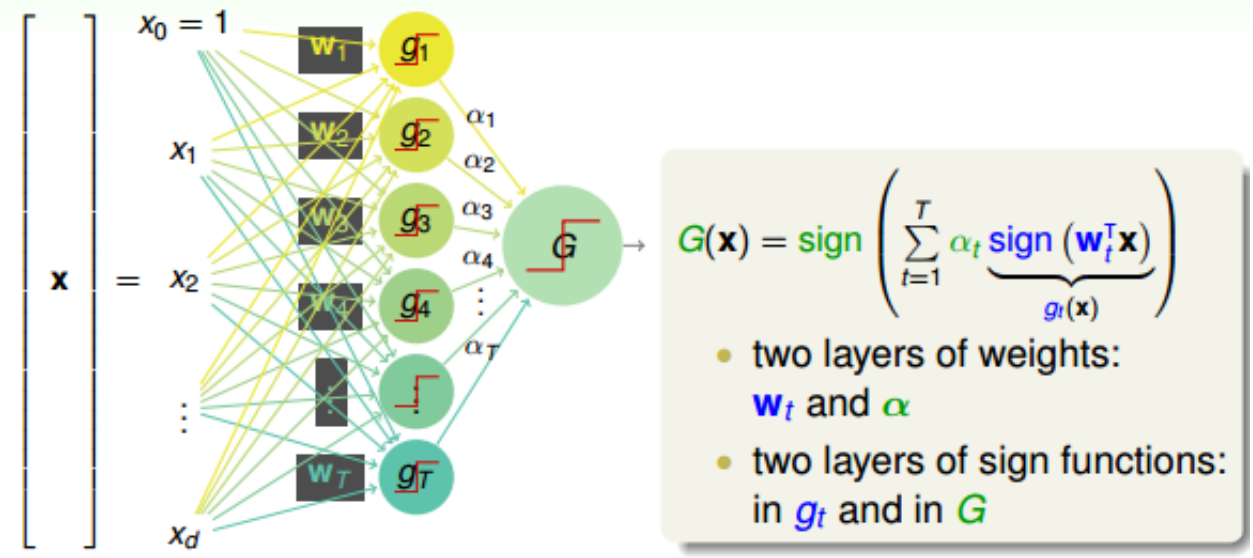
台湾大学林轩田机器学习技法课程学习笔记12 -- Neural Network

作者：红色石头
微信公众号：AI有道（ID：redstonewill）

上节课我们主要介绍了Gradient Boosted Decision Tree。GBDT通过使用functional gradient的方法得到一棵一棵不同的树，然后再使用steepest descent的方式给予每棵树不同的权重，最后可以用来处理任何而定error measure。上节课介绍的GBDT是以regression为例进行介绍的，使用的是squared error measure。本节课讲介绍一种出现时间较早，但当下又非常火的一种机器算法模型，就是神经网络（Neural Network）。

Motivation

在之前的机器学习基石课程中，我们就接触过Perceptron模型了，例如PLA算法。Perceptron就是在矩$g_t(x)$外面加上一个sign函数，取值为{-1,+1}。现在，如果把许多perceptrons线性组合起来，得到的模型G就如下图所示：

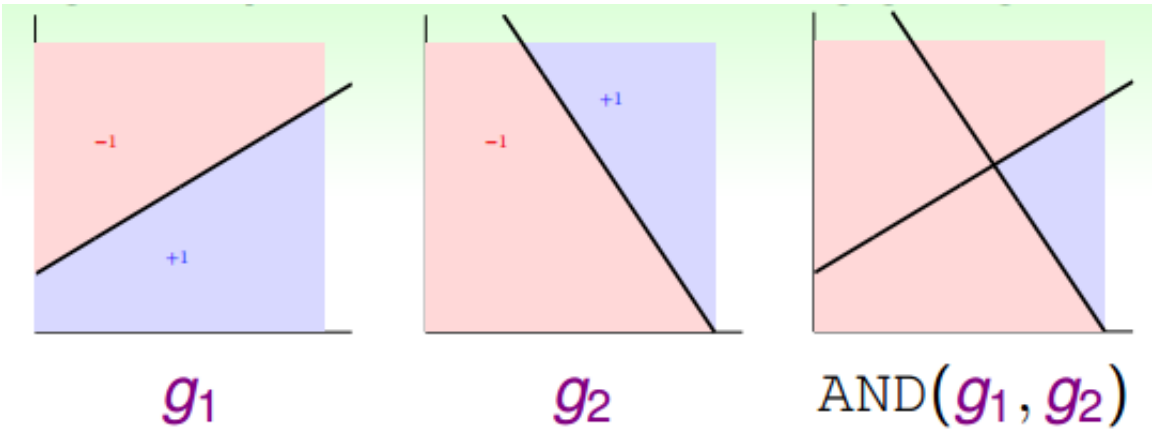


将左边的输入$(x_0, x_1, x_2, \cdots, x_d)$与T个不同的权重$(w_1, w_2, \cdots, w_T)$相乘（每个$w_i$是d+1维的），得到T个不同的perceptrons为$(g_1, g_2, \cdots, g_T)$。最后，每个g_t给予不同的权重$(\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_T)$，线性组合得到G。G也是一个perceptron模型。

从结构上来说，上面这个模型包含了两层的权重，分别是w_t和α。同时也包含了两层的sign函数，分别是g_t和G。那么这样一个由许多感知机linear aggregation的模型能实现什么样的boundary呢？

举个简单的例子，如下图所示，g_1和g_2分别是平面上两个perceptrons。其中，红色表示-1，蓝色表示+1。这两个perceptrons线性组合可能得到下图右侧的模型，这表示的

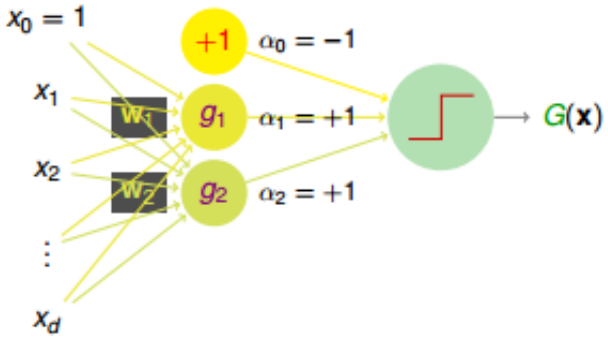
是g_1和g_2进行与（AND）的操作，蓝色区域表示+1。



如何通过感知机模型来实现上述的$AND(g_1, g_2)$逻辑操作呢？一种方法是令第二层中的$\alpha_0 = -1, \alpha_1 = +1, \alpha_2 = +1$。这样，G(x)就可表示为：

$$G(x) = sign(-1 + g_1(x) + g_2(x))$$

g_1和g_2的取值是{-1,+1}，当$g_1 = -1$，$g_2 = -1$时，G(x)=0；当$g_1 = -1$，$g_2 = +1$时，G(x)=0；当$g_1 = +1$，$g_2 = -1$时，G(x)=0；当$g_1 = +1$，$g_2 = +1$时，G(x)=1。感知机模型如下所示：



$G(\mathbf{x}) = \text{sign}(-1 + g_1(\mathbf{x}) + g_2(\mathbf{x}))$

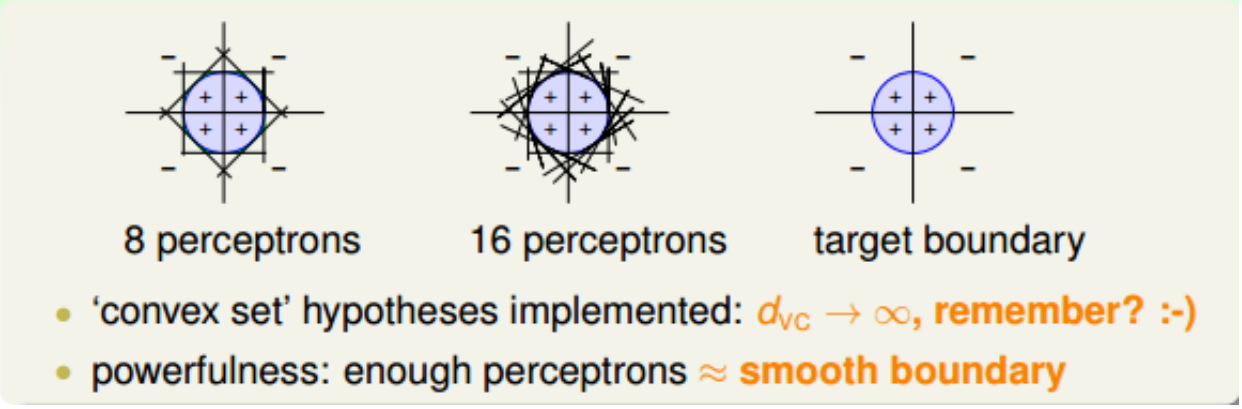
- $g_1(\mathbf{x}) = g_2(\mathbf{x}) = +1$ (TRUE): $G(\mathbf{x}) = +1$ (TRUE)
- otherwise: $G(\mathbf{x}) = -1$ (FALSE)
- $G \equiv \text{AND}(g_1, g_2)$

这个例子说明了一些简单的线性边界，如上面的g_1和g_2，在经过一层感知机模型，经线性组合后，可以得到一些非线性的复杂边界（AND运算）G(x)。

除此之外，或（OR）运算和非（NOT）运算都可以由感知机建立相应的模型，非常简单。

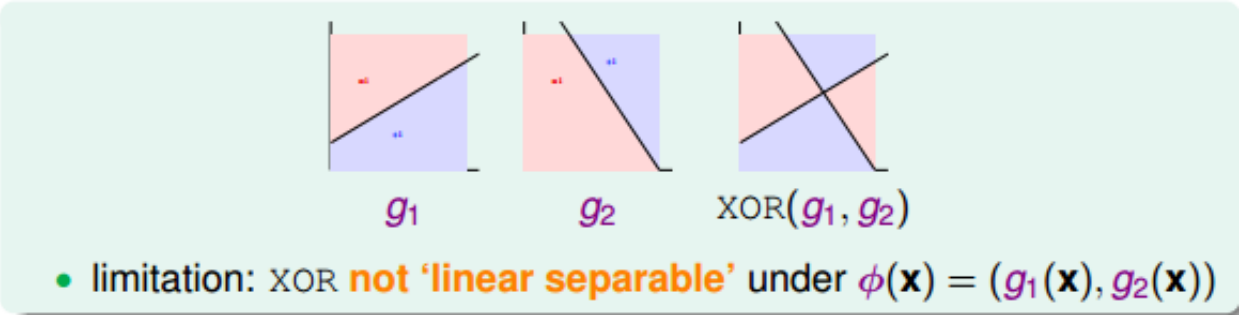
所以说，linear aggregation of perceptrons实际上是非常powerful的模型同时也是非常complicated模型。再看下面一个例子，如果二维平面上有个圆形区域，圆内表示+1，圆外表示-1。这样复杂的圆形边界是没有办法使用单一perceptron来解决的。如果使用8个perceptrons，用刚才的方法线性组合起来，能够得到一个很接近圆形的边界（八边形）。如果使用16个perceptrons，那么得到的边界更接近圆形（十六边形）。因此，使用的perceptrons越多，就能得到各种任意的convex set，即凸多边形边界。

之前我们在机器学习基石中介绍过，convex set的VC Dimension趋向于无穷大（2^N）。这表示只要perceptrons够多，我们能得到任意可能的情况，可能的模型。但是，这样的坏处是模型复杂度可能会变得很大，从而造成过拟合（overfitting）。



总的来说，足够数目的perceptrons线性组合能够得到比较平滑的边界和稳定的模型，这也是aggregation的特点之一。

但是，也有单层perceptrons线性组合做不到的事情。例如刚才我们将的AND、OR、NOT三种逻辑运算都可以由单层perceptrons做到，而如果是异或（XOR）操作，就没有办法只用单层perceptrons实现。这是因为XOR得到的是非线性可分的区域，如下图所示，没有办法由g_1和g_2线性组合实现。所以说linear aggregation of perceptrons模型的复杂度还是有限制的。

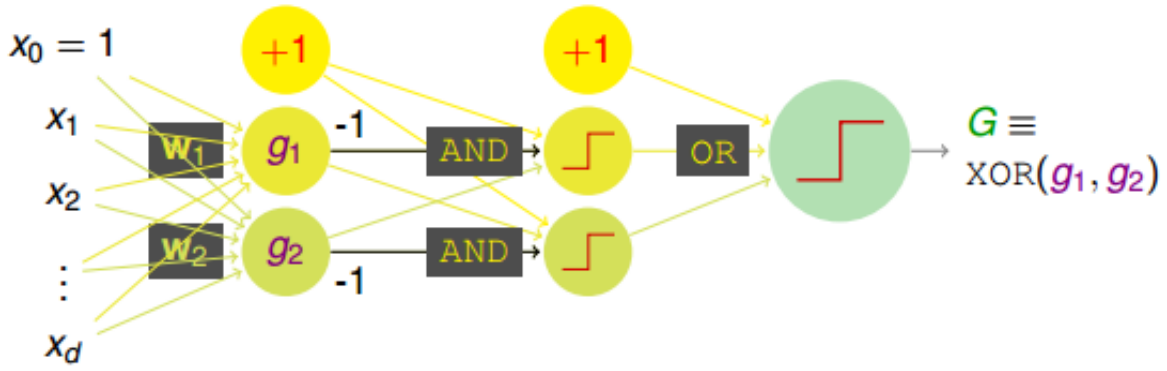


那么，为了实现XOR操作，可以使用多层perceptrons，也就是说一次transform不行，我们就用多层的transform，这其实就是Basic Neural Network的基本原型。下面我们就尝试使用两层perceptrons来实现XOR的操作。

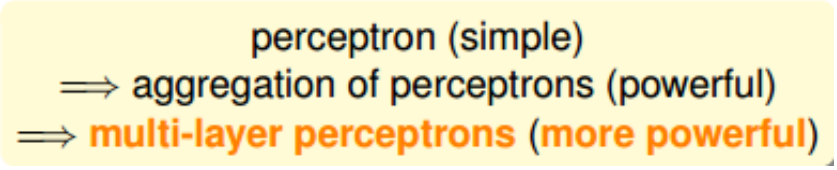
首先，根据布尔运算，异或XOR操作可以拆分成：

$$XOR(g_1, g_2) = OR(AND(-g_1, g_2), AND(g_1, -g_2))$$

这种拆分实际上就包含了两层transform。第一层仅有AND操作，第二层是OR操作。这种两层的感知机模型如下所示：



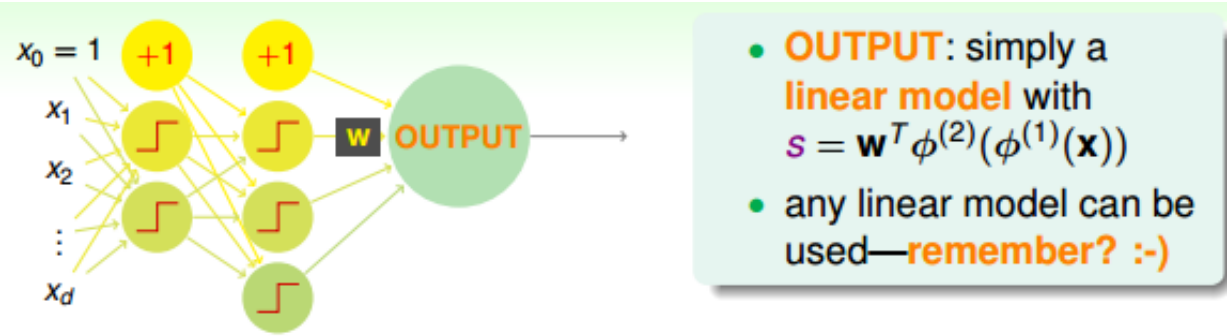
这样，从AND操作到XOR操作，从简单的aggregation of perceptrons到multi-layer perceptrons，感知机层数在增加，模型的复杂度也在增加，使最后得到的G能更容易解决一些非线性的复杂问题。这就是基本神经网络的基本模型。



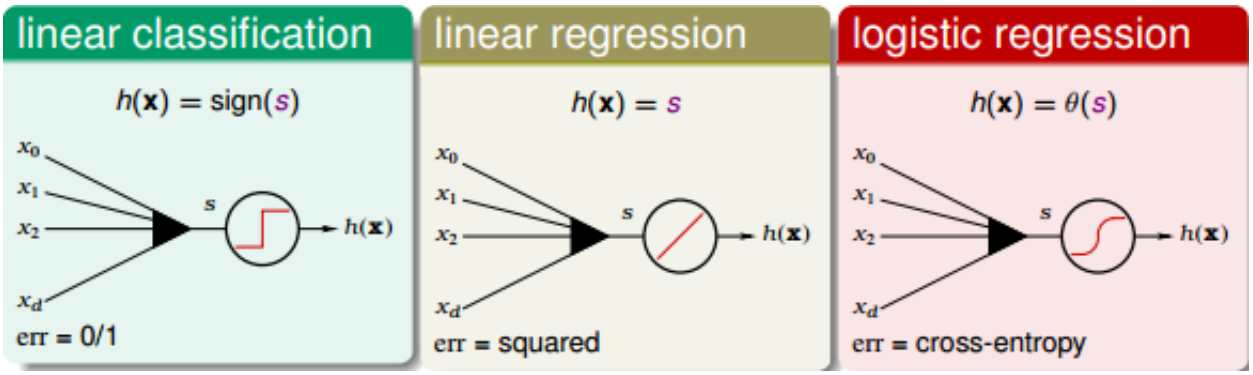
顺便提一下，这里所说的感知机模型实际上就是在模仿人类的神经元模型（这就是Neural Network名称的由来）。感知机模型每个节点的输入就对应神经元的树突dendrite，感知机每个节点的输出就对应神经元的轴突axon。

Neural Network Hypothesis

上一部分我们介绍的这种感知机模型其实就是Neural Network。输入部分经过一层一层的运算，相当于一层一层的transform，最后通过最后一层的权重，得到一个分数score。即在OUTPUT层，输出的就是一个线性模型。得到s后，下一步再进行处理。



我们之前已经介绍过三种线性模型：linear classification，linear regression，logistic regression。那么，对于OUTPUT层的分数s，根据具体问题，可以选择最合适的线性模型。如果是binary classification问题，可以选择linear classification模型；如果是linear regression问题，可以选择linear regression模型；如果是soft classification问题，则可以选择logistic regression模型。本节课接下来将以linear regression为例，选择squared error来进行衡量。



上面讲的是OUTPUT层，对于中间层，每个节点对应一个perceptron，都有一个transform运算。上文我们已经介绍过的transformation function是阶梯函数sign()。那除了sign()函数外，有没有其他的transformation function呢？

如果每个节点的transformation function都是线性运算（跟OUTPUT端一样），那么由每个节点的线性模型组合成的神经网络模型也必然是线性的。这跟直接使用一个线性模型在效果上并没有什么差异，模型能力不强，反而花费了更多不必要的力气。所以一般来说，中间节点不会选择线性模型。

如果每个节点的transformation function都是阶梯函数（即sign()函数）。这是一个非线性模型，但是由于阶梯函数是离散的，并不是处处可导，所以在优化计算时比较难处理。所以，一般也不选择阶梯函数作为transformation function。

既然线性函数和阶梯函数都不太适合作为transformation function，那么最常用的一种transformation function就是tanh(s)，其表达式如下：

$$tanh(s) = \frac{exp(s) - exp(-s)}{exp(s) + exp(-s)}$$

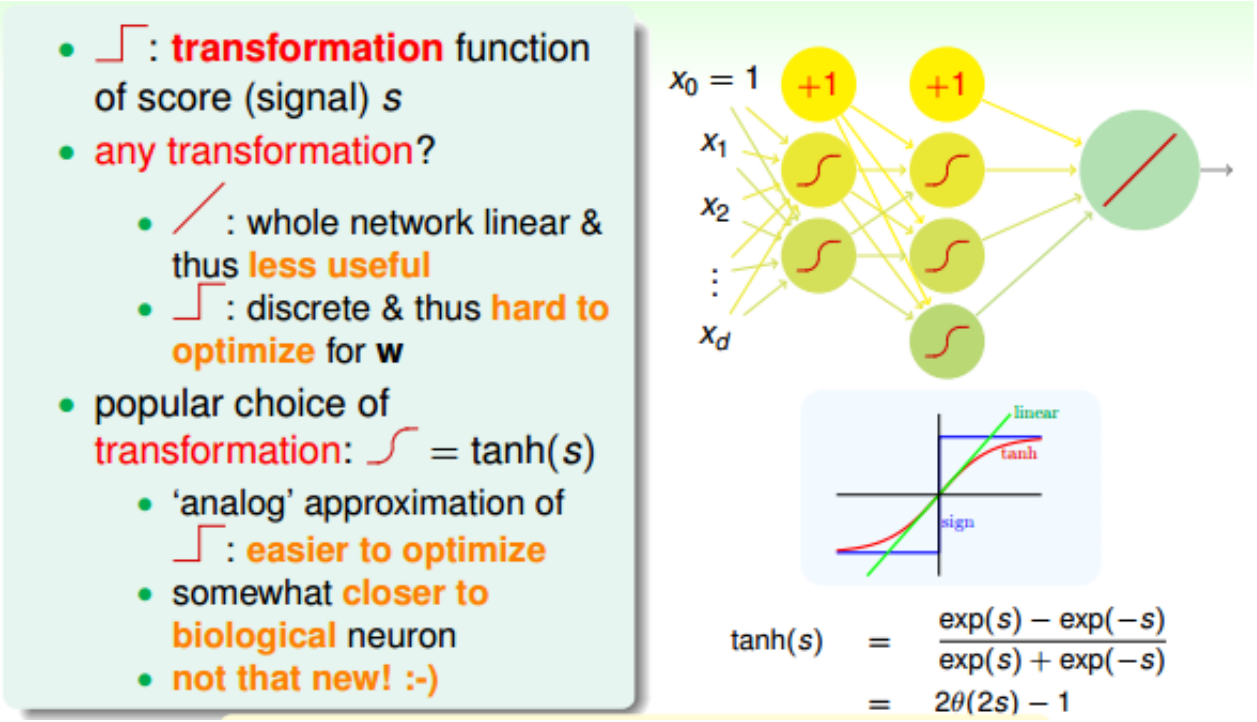
tanh(s)函数是一个平滑函数，类似“s”型。当|s|比较大的时候，tanh(s)与阶梯函数相近；当|s|比较小的时候，tanh(s)与线性函数比较接近。从数学上来说，由于处处连续可导，便于最优化计算。而且形状上类似阶梯函数，具有非线性的性质，可以得到比较复杂强大的模型。

顺便提一下，tanh(x)函数与sigmoid函数存在下列关系：

$$tanh(s) = 2\theta(2s) - 1$$

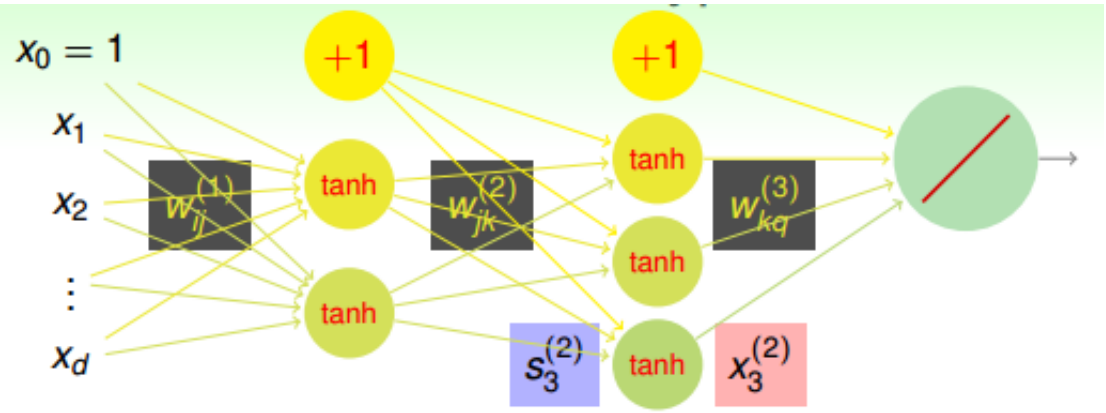
其中，

$$\theta(s) = \frac{1}{1 + exp(-s)}$$



那么，接下来我们就使用tanh函数作为神经网络中间层的transformation function，所有的数学推导也基于此。实际应用中，可以选择其它的transformation function，不同的transformation function，则有不同的推导过程。

下面我们将仔细来看看Neural Network Hypothesis的结构。如下图所示，该神经网络左边是输入层，中间两层是隐藏层，右边是输出层。整体上来说，我们设定输入层为第0层，然后往右分别是第一层、第二层，输出层即为第3层。



Neural Network Hypothesis中，$d^{(0)}, d^{(1)}, \cdots, d^{(L)}$分别表示神经网络的第几层，其中L为总层数。例如上图所示的是3层神经网络，L=3。我们先来看看每一层的权重$w_{ij}^{(l)}$，上标l满足$1 \leq l \leq L$，表示是位于哪一层。下标i满足$0 \leq i \leq d^{(l-1)}$，表示前一层输出的个数加上bias项（常数项）。下标j满足$1 \leq j \leq d^{(l)}$，表示该层节点的个数（不包括bias项）。

对于每层的分数score，它的表达式为：

$$s_j^{(l)} = \sum_{i=0}^{d^{(l-1)}} w_{ij}^{(l)} x_i^{(l-1)}$$

对于每层的transformation function，它的表达式为：

$$x_j^{(l)} = \begin{cases} tanh(s_j^{(l)}), & if\ l < L \\ s_j^{(l)}, & if\ l = L \end{cases}$$

因为是regression模型，所以在输出层（l=L）直接得到$x_j^{(l)} = s_j^{(l)}$。

$d^{(0)}$-$d^{(1)}$-$d^{(2)}$-. . . -$d^{(L)}$ Neural Network (NNet)

$$w_{ij}^{(\ell)}: \begin{cases} 1 \le \ell \le L & \text{layers} \\ 0 \le i \le d^{(\ell-1)} & \text{inputs} \\ 1 \le j \le d^{(\ell)} & \text{outputs} \end{cases}, \text{ score } s_j^{(\ell)} = \sum_{i=0}^{d^{(\ell-1)}} w_{ij}^{(\ell)} x_i^{(\ell-1)},$$

$$\text{transformed } x_j^{(\ell)} = \begin{cases} \tanh\left(s_j^{(\ell)}\right) & \text{if } \ell < L \\ s_j^{(\ell)} & \text{if } \ell = L \end{cases}$$

介绍完Neural Network Hypothesis的结构之后，我们来研究下这种算法结构到底有什么实际的物理意义。还是看上面的神经网络结构图，每一层输入到输出的运算过程，实际上都是一种transformation，而转换的关键在于每个权重值$w_{ij}^{(l)}$。每层网络利用输入x和权重w的乘积，在经过tanh函数，得到该层的输出，从左到右，一层一层地进行。其中，很明显，x和w的乘积$\sum_{i=0}^{d^{(l-1)}} w_{ij}^{(l)} x_i^{(l-1)}$越大，那么tanh(wx)就会越接近1，表明这种transformation效果越好。再想一下，w和x是两个向量，乘积越大，表明两个向量内积越大，越接近平行，则表明w和x有模式上的相似性。从而，更进一步说明了如果每一层的输入向量x和权重向量w具有模式上的相似性，比较接近平行，那么transformation的效果就比较好，就能得到表现良好的神经网络模型。也就是说，神经网络训练的核心就是pattern extraction，即从数据中找到数据本身蕴含的模式和规律。通过一层一层找到这些模式，找到与输入向量x最契合的权重向量w，最后再由G输出结果。

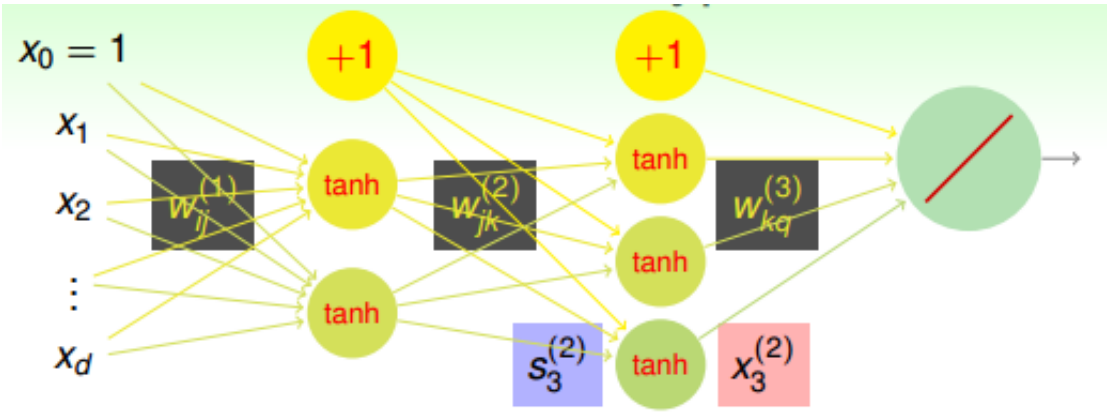
- each layer: **transformation** to be **learned** from data
- $\phi^{(\ell)}(\mathbf{x}) = \tanh\left(\begin{bmatrix} \sum_{i=0}^{d^{(\ell-1)}} w_{i1}^{(\ell)} x_i^{(\ell-1)} \\ \vdots \end{bmatrix}\right)$

  —whether **x** 'matches' weight vectors in pattern

NNet: **pattern extraction** with layers of connection weights

Neural Network Learning

我们已经介绍了Neural Network Hypothesis的结构和算法流程。确定网络结构其实就是确定各层的权重值$w_{ij}^{(l)}$。那如何根据已有的样本数据，找到最佳的权重$w_{ij}^{(l)}$使error最小化呢？下面我们将详细推导。



首先，我们的目标是找到最佳的$w_{ij}^{(l)}$让$E_{in}(\{w_{ij}^{(l)}\})$最小化。如果只有一层隐藏层，就相当于是aggregation of perceptrons。可以使用我们上节课介绍的gradient boosting算法来一个一个确定隐藏层每个神经元的权重，输入层到隐藏层的权重可以通过C&RT算法计算的到。这不是神经网络常用的算法。如果隐藏层个数有两个或者更多，那么aggregation of perceptrons的方法就行不通了。就要考虑使用其它方法。

根据error function的思想，从输出层来看，我们可以得到每个样本神经网络预测值与实际值之间的squared error：$e_n = (y_n - NNet(x_n))^2$，这是单个样本点的error。那么，我们只要能建立e_n与每个权重$w_{ij}^{(l)}$的函数关系，就可以利用GD或SGD算法对$w_{ij}^{(l)}$求偏微分，不断迭代优化$w_{ij}^{(l)}$值，最终得到使e_n最小时对应的$w_{ij}^{(l)}$。

- goal: learning all $\{w_{ij}^{(\ell)}\}$ to minimize $E_{\text{in}}\left(\{w_{ij}^{(\ell)}\}\right)$
- one hidden layer: simply aggregation of perceptrons
  —gradient boosting to determine hidden neuron one by one
- multiple hidden layers? not easy
- let $e_n = (y_n - \text{NNet}(\mathbf{x}_n))^2$:
  can apply (stochastic) GD after computing $\frac{\partial e_n}{\partial w_{ij}^{(\ell)}}$!

为了建立e_n与各层权重$w_{ij}^{(l)}$的函数关系，求出e_n对$w_{ij}^{(l)}$的偏导数$\frac{\partial e_n}{w_{ij}^{(l)}}$，我们先来看输出层如何计算$\frac{\partial e_n}{w_{i1}^{(L)}}$。$e_n$与$w_{i1}^{(L)}$的函数关系为：

$$e_n = (y_n - \text{NNet}(\mathbf{x}_n))^2 = \left(y_n - s_1^{(L)}\right)^2 = \left(y_n - \sum_{i=0}^{d^{(L-1)}} w_{i1}^{(L)} x_i^{(L-1)}\right)^2$$

计算e_n对$w_{i1}^{(L)}$的偏导数，得到：

specially (output layer)
$(0 \le i \le d^{(L-1)})$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial e_n}{\partial w_{i1}^{(L)}} \\ = & \frac{\partial e_n}{\partial s_1^{(L)}} \cdot \frac{\partial s_1^{(L)}}{\partial w_{i1}^{(L)}} \\ = & -2\left(y_n - s_1^{(L)}\right) \cdot \left(x_i^{(L-1)}\right) \end{aligned}$$

以上是输出层求偏导的结果。如果是其它层，即$l \neq L$，偏导计算可以写成如下形式：

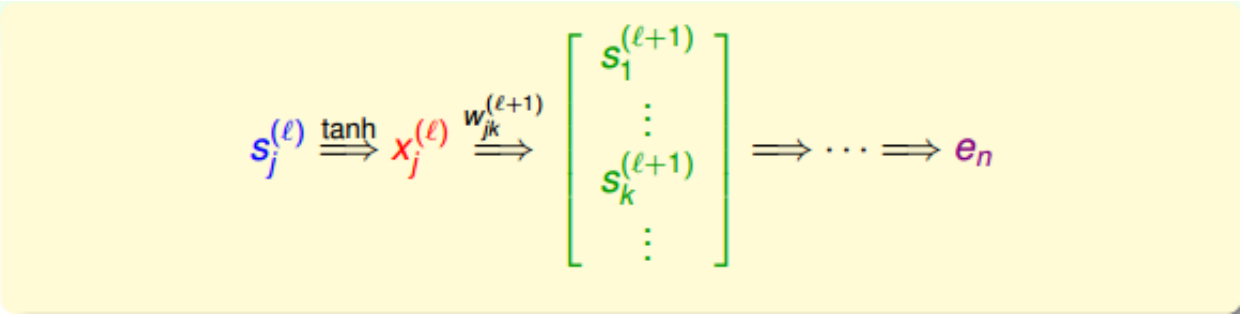
generally $(1 \le \ell < L)$
$(0 \le i \le d^{(\ell-1)}; 1 \le j \le d^{(\ell)})$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial e_n}{\partial w_{ij}^{(\ell)}} \\ = & \frac{\partial e_n}{\partial s_j^{(\ell)}} \cdot \frac{\partial s_j^{(\ell)}}{\partial w_{ij}^{(\ell)}} \\ = & \delta_j^{(\ell)} \cdot \left(x_i^{(\ell-1)}\right) \end{aligned}$$

上述推导中，令e_n与第l层第j个神经元的分数$s_j^{(l)}$的偏导数记为$\delta_j^{(l)}$。即：

$$\frac{\partial e_n}{\partial s_j^{(l)}} = \delta_j^{(l)}$$

当$l = L$时，$\delta_1^{(L)} = -2(y_n - s_1^{(L)})$；当$l \neq L$时，$\delta_j^{(l)}$是未知的，下面我们将进行运算推导，看看不同层之间的$\delta_j^{(l)}$是否有递推关系。



如上图所示，第l层第j个神经元的分数$s_j^{(l)}$经过tanh函数，得到该层输出$x_j^{(l)}$，再与下一层权重$w_{jk}^{(l+1)}$相乘，得到第l+1层的分数$s_j^{(l+1)}$，直到最后的输出层e_n。

那么，利用上面$s_j^{(l)}$到$s_j^{(l+1)}$这样的递推关系，我们可以对偏导数$\delta_j^{(l)}$做一些中间变量替换处理，得到如下表达式：

$$\begin{aligned}\delta_j^{(\ell)} = \frac{\partial e_n}{\partial s_j^{(\ell)}} &= \sum_{k=1}^{d^{(\ell+1)}} \frac{\partial e_n}{\partial s_k^{(\ell+1)}} \frac{\partial s_k^{(\ell+1)}}{\partial x_j^{(\ell)}} \frac{\partial x_j^{(\ell)}}{\partial s_j^{(\ell)}} \\ &= \sum_k \left(\delta_k^{(\ell+1)}\right) \left(w_{jk}^{(\ell+1)}\right) \left(\tanh'\left(s_j^{(\ell)}\right)\right)\end{aligned}$$

值得一提的是，上式中有个求和项，其中k表示下一层即l+1层神经元的个数。表明l层的$s_j^{(l)}$与l+1层的所有$s_k^{(l+1)}$都有关系。因为$s_j^{(l)}$参与到每个$s_k^{(l+1)}$的运算中了。

这样，我们得到了$\delta_j^{(l)}$与$\delta_k^{(l)}$的递推关系。也就是说如果知道了$\delta_k^{(l)}$的值，就能推导出$\delta_j^{(l)}$的值。而最后一层，即输出层的$\delta_1^{(L)} = -2(y_n - s_1^{(L)})$，那么就能一层一层往前推导，得到每一层的$\delta_j^{(l)}$，从而可以计算出$e_n$对各个$w_{ij}^{(l)}$的偏导数$\frac{\partial e_n}{w_{ij}^{(l)}}$。计算完偏微分之后，就可以使用GD或SGD算法进行权重的迭代优化，最终得到最优解。

神经网络中，这种从后往前的推导方法称为Backpropagation Algorithm，即我们常常听到的BP神经网络算法。它的算法流程如下所示：

Backprop on NNet

initialize all weights $w_{ij}^{(\ell)}$
for $t = 0, 1, \ldots, T$

1. stochastic: randomly pick $n \in \{1, 2, \cdots, N\}$
2. forward: compute all $x_j^{(\ell)}$ with $\mathbf{x}^{(0)} = \mathbf{x}_n$
3. backward: compute all $\delta_j^{(\ell)}$ subject to $\mathbf{x}^{(0)} = \mathbf{x}_n$
4. gradient descent: $w_{ij}^{(\ell)} \leftarrow w_{ij}^{(\ell)} - \eta x_i^{(\ell-1)} \delta_j^{(\ell)}$

return $g_{\text{NNET}}(\mathbf{x}) = \left(\cdots \tanh\left(\sum_j w_{jk}^{(2)} \cdot \tanh\left(\sum_i w_{ij}^{(1)} x_i\right)\right)\right)$

上面采用的是SGD的方法，即每次迭代更新时只取一个点，这种做法一般不够稳定。所以通常会采用mini-batch的方法，即每次选取一些数据，例如$\frac{N}{10}$，来进行训练，最后求平均值更新权重w。这种做法的实际效果会比较好一些。

Optimization and Regularization

经过以上的分析和推导，我们知道神经网络优化的目标就是让$E_{in}(w)$最小化。本节课我们采用error measure是squared error，当然也可以采用其它的错误衡量方式，只要在推导上做稍稍修改就可以了，此处不再赘述。

$$E_{\text{in}}(\mathbf{w}) = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} \text{err}\left(\left(\cdots \tanh\left(\sum_j w_{jk}^{(2)} \cdot \tanh\left(\sum_i w_{ij}^{(1)} x_{n,i}\right)\right)\right), y_n\right)$$

下面我们将主要分析神经网络的优化问题。由于神经网络由输入层、多个隐藏层、输出层构成，结构是比较复杂的非线性模型，因此$E_{in}(w)$可能有许多局部最小值，是non-convex的，找到全局最小值（globalminimum）就会困难许多。而我们使用GD或SGD算法得到的很可能就是局部最小值（local minimum）。

基于这个问题，不同的初始值权重$w_{ij}^{(l)}$通常会得到不同的local minimum。也就是说最终的输出G与初始权重$w_{ij}^{(l)}$有很大的关系。在选取$w_{ij}^{(l)}$上有个技巧，就是通常选择比较小的值，而且最好是随机random选择。这是因为，如果权重$w_{ij}^{(l)}$很大，那么根据tanh函数，得到的值会分布在两侧比较平缓的位置（类似于饱和saturation），这时候梯度很小，每次迭代权重可能只有微弱的变化，很难在全局上快速得到最优解。而随机选择的原因是通常对权重$w_{ij}^{(l)}$如何选择没有先验经验，只能通过random，从普遍概率上选择初始值，随机性避免了人为因素的干预，可以说更有可能经过迭代优化得到全局最优解。

- generally non-convex when multiple hidden layers
  - not easy to reach global minimum
  - GD/SGD with backprop only gives local minimum
- different initial $w_{ij}^{(\ell)} \Longrightarrow$ different local minimum
  - somewhat 'sensitive' to initial weights
  - large weights $\Longrightarrow$ saturate (small gradient)
  - advice: try some random & small ones

下面从理论上看一下神经网络模型的VC Dimension。对于tanh这样的transfer function，其对应的整个模型的复杂度$d_{vc} = O(VD)$。其中V是神经网络中神经元的个数（不包括bias点）,D表示所有权值的数量。所以，如果V足够大的时候，VC Dimension也会非常大，这样神经网络可以训练出非常复杂的模型。但同时也可能会造成过拟合overfitting。所以，神经网络中神经元的数量V不能太大。

为了防止神经网络过拟合，一个常用的方法就是使用regularization。之前我们就介绍过可以在error function中加入一个regularizer，例如熟悉的L2 regularizer $\Omega(w)$：

$$\Omega(w) = \sum (w_{ij}^{(l)})^2$$

但是，使用L2 regularizer 有一个缺点，就是它使每个权重进行等比例缩小（shrink）。也就是说大的权重缩小程度较大，小的权重缩小程度较小。这会带来一个问题，就是等比例缩小很难得到值为零的权重。而我们恰恰希望某些权重$w_{ij}^{(l)} = 0$，即权重的解是松散（sparse）的。因为这样能有效减少VC Dimension，从而减小模型复杂度，防止过拟合发生。

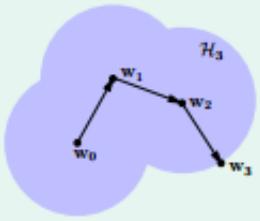
那么为了得到sparse解，有什么方法呢？我们之前就介绍过可以使用L1 regularizer：$\sum |wij^{(l)}|$，但是这种做法存在一个缺点，就是包含绝对值不容易微分。除此之外，另外一种比较常用的方法就是使用weight-elimination regularizer。weight-elimination regularizer类似于L2 regularizer，只不过是在L2 regularizer上做了尺度的缩小，这样能使large weight和small weight都能得到同等程度的缩小，从而让更多权重最终为零。weight-elimination regularizer的表达式如下：

$$\sum \frac{(w_{ij}^{(l)})^2}{1 + (w_{ij}^{(l)})^2}$$

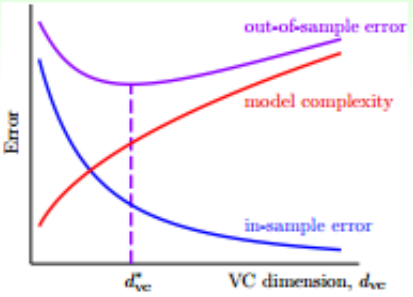
- 'shrink' weights:
  large weight → large shrink; small weight → small shrink
- want $w_{ij}^{(\ell)} = 0$ (sparse) to effectively **decrease** d_{VC}
  - L1 regularizer: $\sum \left| w_{ij}^{(\ell)} \right|$, but not differentiable
  - weight-elimination ('scaled' L2) regularizer:
    large weight → median shrink; small weight → median shrink

除了weight-elimination regularizer之外，还有另外一个很有效的regularization的方法，就是Early Stopping。简而言之，就是神经网络训练的次数t不能太多。因为，t太大的时候，相当于给模型寻找最优值更多的可能性，模型更复杂，VC Dimension增大，可能会overfitting。而t不太大时，能有效减少VC Dimension，降低模型复杂度，从而起到regularization的效果。E_{in}和E_{test}随训练次数t的关系如下图右下角所示：

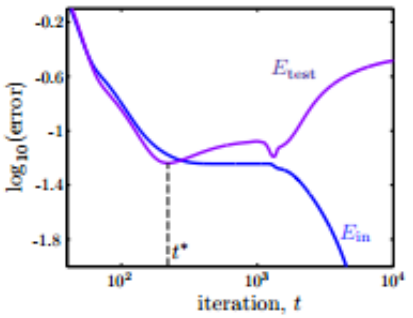
- **GD/SGD (backprop)** visits more weight combinations as t increases



- smaller t effectively decrease d_{VC}
- better 'stop in middle': early stopping



(d_{VC}^* in middle, remember? :-))



那么，如何选择最佳的训练次数t呢？可以使用validation进行验证选择。

总结

本节课主要介绍了Neural Network模型。首先，我们通过使用一层甚至多层的perceptrons来获得更复杂的非线性模型。神经网络的每个神经元都相当于一个Neural Network Hypothesis，训练的本质就是在每一层网络上进行pattern extraction，找到最合适的权重$w_{ij}^{(l)}$，最终得到最佳的G。本课程以regression模型为例，最终的G是线性模型，而中间各层均采用tanh函数作为transform function。计算权重$w_{ij}^{(l)}$的方法就是采用GD或者SGD，通过Backpropagation算法，不断更新优化权重值，最终使得$E_{in}(w)$最小化，即完成了整个神经网络的训练过程。最后，我们提到了神经网络的

可以使用一些regularization来防止模型过拟合。这些方法包括随机选择较小的权重初始值，使用weight-elimination regularizer或者early stopping等。

注明：

文章中所有的图片均来自台湾大学林轩田《机器学习技法》课程