

函数逼近是神经网络强大应用之一同时也是其理论内核。神经网络从样本数据出发,计算输入和输出结果集之间的映射关系,从而对未知函数进行非线性逼近。相关研究表明深度神经网络能够为数学信号处理中使用的非常广泛的函数和函数类提供信息理论上的最佳逼近。对于非常不同的函数类(例如平方运算、乘法、多项式、正弦函数),一般的平滑函数甚至一维振荡纹理和分形函数(如 Weierstrass 函数),神经网络能够提供指数逼近精度,其中后者尚没有除深度网络以外的先前已知方法能够完成指数近似精度,即近似误差在网络中非零权重的数量上呈指数衰减。在充分光滑函数的近似中,相关研究表明有限宽深度网络要求的连通性严格小于有限深度的宽网络。如图 3-1 所示,下面将展示深度神经网络逼近乘法、多项式、光滑函数和正余弦函数的数学证明。

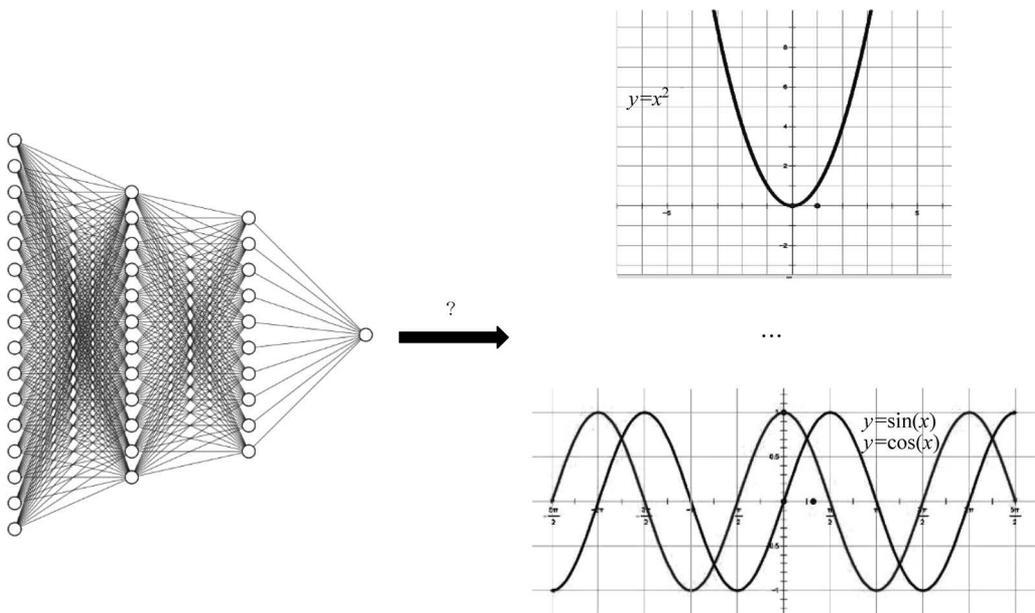


图 3-1 神经网络对基础函数进行逼近

### 3.1 基本的 ReLU 网络定义

本节对基本的 ReLU 网络和一些相关的设置进行形式化定义,以便后续用其对多种多样的函数进行逼近。首先需要考虑的一些符号定义如下:对于函数  $f(x): \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$  和集合

$\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$ , 定义

$$\|f\|_{L^\infty(\Omega)} := \sup\{|f(\mathbf{x})| : \mathbf{x} \in \Omega\}$$

其中,  $L^p(\mathbb{R}^d)$  和  $L^p(\mathbb{R}^d, \mathbb{C})$  分别表示  $L^p$  函数的实数空间和复数空间。在处理简单函数的近似误差时, 例如  $(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \mapsto \mathbf{x}\mathbf{y}$ , 为简单起见, 将其记为  $\|f(\mathbf{x}, \mathbf{y}) - \mathbf{x}\mathbf{y}\|_{L^p(\Omega)}$ 。对于向量  $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^d$ , 定义  $\|\mathbf{b}\|_\infty := \max_{i=1,2,\dots,d} |b_i|$ , 相似地, 对于矩阵  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ , 有  $\|\mathbf{A}\|_\infty := \max_{i,j} |A_{i,j}|$ 。将  $n \times n$  的单位矩阵表示为  $\mathbf{I}_2$ 。对于一个集合  $X \in \mathbb{R}^d$ ,  $|X|$  代表  $X$  的勒贝格 (Lebesgue) 距离。

由于神经网络结构和激活函数种类繁多, 在计算机视觉、语音识别、自然语言处理等众多领域, ReLU 网络最为广泛使用, 因此这里限定 ReLU 激活函数, 并且考虑下面的网络结构。

**【定义 3.1】** 设  $L \in \mathbb{N}$  和  $N_0, N_1, \dots, N_L \in \mathbb{N}$ , ReLU 神经网络  $\Phi$  具有映射关系  $\Phi: \mathbb{R}^{N_0} \rightarrow \mathbb{R}^{N_L}$ , 则有

$$\Phi = \begin{cases} F_1, & L = 1 \\ F_2 \circ \sigma \circ F_1, & L = 2 \\ F_L \circ \sigma \circ F_{L-1} \circ \sigma \circ \dots \circ \sigma \circ F_1, & L \geq 3 \end{cases} \quad (3-1)$$

其中,  $l \in \{1, 2, \dots, L\}$ ,  $F_l: \mathbb{R}^{N_{l-1}} \rightarrow \mathbb{R}^{N_l}$ ,  $F_l(\mathbf{x}) := \mathbf{w}_l \mathbf{x} + \mathbf{b}_l$  表示仿射变换, 矩阵  $\mathbf{w}_l \in \mathbb{R}^{N_l \times N_{l-1}}$ ,  $\mathbf{b}_l \in \mathbb{R}^{N_l}$  表示偏置向量, ReLU 激活函数  $\sigma: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ ,  $\sigma(x) = \max(x, \mathbf{0})$ , 且  $\sigma(x_1, x_2, \dots, x_N) := (\sigma(x_1), \sigma(x_2), \dots, \sigma(x_N))$ 。另外, 将输入维度  $N_0 = d$ , 输出维度  $N_L = d'$  的 ReLU 网络集合记为  $\xi_{d,d'}$ 。关于 ReLU 网络的其他定义如下。

(1) 连通性  $\mathcal{M}(\Phi)$  表示矩阵  $\mathbf{w}_l, l \in \{1, 2, \dots, L\}$  和向量  $\mathbf{b}_l, l \in \{1, 2, \dots, L\}$  中非零元素的数量。

(2) 网络深度  $\mathcal{D}(\Phi) := L$ 。

(3) 网络宽度  $\mathcal{W}(\Phi) := \max_{l=0,1,\dots,L} N_l$ 。

(4) 权重大小  $\mathcal{A}(\Phi) := \max_{l=1,2,\dots,L} \{\|\mathbf{w}_l\|_\infty, \|\mathbf{b}_l\|_\infty\}$ 。

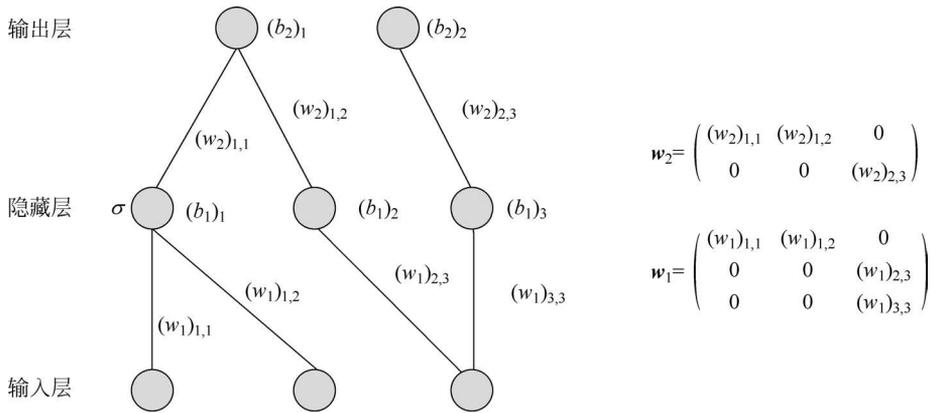
注意,  $N_0$  是输入层的维度, 将其表示第 0 层,  $N_1, N_2, \dots, N_{L-1}$  则分别是第 1 层和第  $L-1$  层,  $N_L$  指输出层的维度。深度的定义  $\mathcal{D}(\Phi)$  是指式 (3-1) 中的仿射变换的堆叠数量, 即网络深度。由此定义可知, 单隐藏层神经网络深度为 2 层。出于技术目的, 将标准仿射变换视为深度为 1 的神经网络。

令矩阵  $(w_l)_{i,j}$  表示第  $l-1$  层第  $j$  个节点与  $l$  层第  $i$  个节点之间的权重,  $(b_l)_i$  是第  $l$  层第  $i$  个节点偏置, 由此表示的单隐藏层神经网络如图 3-2 所示。

主要考虑  $\Phi: \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ , 也就是  $N_L = 1$  的情况, 很容易将其泛化到  $N_L > 1$  的情况。本章使用的神经网络结构涉及下面介绍的基本元素, 即网络的连接和线性组合。

**【引理 3.1】** 设  $d_1, d_2, d_3 \in \mathbb{N}$ ,  $\Phi_1 \in \xi_{d_1, d_2}$ , 且  $\Phi_2 \in \xi_{d_2, d_3}$ , 则存在网络  $\Psi \in \xi_{d_1, d_3}$ , 其中  $\mathcal{D}(\Psi) \leq \mathcal{D}(\Phi_1) + \mathcal{D}(\Phi_2)$ ,  $\mathcal{M}(\Psi) \leq 2\mathcal{M}(\Phi_1) + 2\mathcal{M}(\Phi_2)$ ,  $\mathcal{W}(\Psi) \leq \max\{2d_2, \mathcal{W}(\Phi_1), \mathcal{W}(\Phi_2)\}$ ,  $\mathcal{A}(\Psi) = \max\{\mathcal{A}(\Phi_1), \mathcal{A}(\Phi_2)\}$ , 且满足

$$\Psi(x) = (\Phi_2 \circ \Phi_1)(x) = \Phi_2[\Phi_1(x)], \quad \forall x \in \mathbb{R}^{d_1} \quad (3-2)$$

图 3-2 一个单隐藏层神经网络的权重 $(w_l)_{i,j}$ , 偏置 $(b_l)_i$  关于边和节点的示意图

**证明:** 此证明基于等式  $x = \rho(x) - \rho(-x)$ 。首先, 由式(3-1)可得

$$\Phi_1 = F_{L_1}^1 \circ \sigma \circ F_{L_1-1}^1 \circ \cdots \circ \sigma \circ F_1^1 \quad \text{和} \quad \Phi_2 = F_{L_2}^2 \circ \sigma \circ F_{L_2-1}^2 \circ \cdots \circ F_2^2 \circ \sigma \circ F_1^2$$

令  $N_{L_1-1}^1$  表示  $\Phi_1$  第  $L_1-1$  层的宽度,  $N_1^2$  表示  $\Phi_2$  第一层的宽度。根据

$$F_{L_1}^1(x) := \begin{pmatrix} \mathbb{I}_{d_2} \\ \mathbb{I}_{d_2} \end{pmatrix} F_{L_1}^1(x), \quad F_1^2(y) := F_1^2((\mathbb{I}_{d_2} - \mathbb{I}_{d_2})y) \quad (3-3)$$

定义仿射变换  $F_{L_1}^1: \mathbb{R}^{N_{L_1-1}^1} \mapsto \mathbb{R}^{2d_2}$ ,  $F_1^2: \mathbb{R}^{2d_2} \mapsto \mathbb{R}^{N_1^2}$ 。

构造网络

$$\Psi := F_{L_2}^2 \circ \sigma \circ \cdots \circ F_2^2 \circ \sigma \circ F_1^2 \circ \sigma \circ F_{L_1}^1 \circ \cdots \circ \sigma \circ F_1^1 \quad (3-4)$$

满足声明的特性。

在本章中, 除有明确的说明以外, 两个神经网络的组合均以引理 3.2 中形式表示。

为了形式化具有可能不同深度的网络的线性组合的概念, 需要下面两个引理展示如何在保留网络输入-输出关系的同时增加网络深度以及如何并行化网络。

**【引理 3.2】** 令  $d_1, d_2, K \in \mathbb{N}$ , 且  $\Phi \in \xi_{d_1, d_2}$ ,  $\mathcal{D}(\Phi) < K$ 。那么, 存在一个网络  $\Psi \in \xi_{d_1, d_2}$ , 满足  $\mathcal{D}(\Psi) < K$ ,  $\mathcal{M}(\Psi) \leq \mathcal{M}(\Phi) + d_2 \mathcal{W}(\Phi) + 2d_2(K - \mathcal{D}(\Phi))$ ,  $\mathcal{W}(\Psi) = \max\{2d_2, \mathcal{W}(\Phi)\}$ ,  $\mathcal{A}(\Psi) = \max\{1, \mathcal{A}(\Phi)\}$ , 且满足  $\Psi(x) = \Phi(x)$ ,  $\forall x \in \mathbb{R}^{d_1}$ 。

**证明:** 令  $F_j(x) := \text{diag}(\mathbb{I}_{d_2}, \mathbb{I}_{d_2})x$ , 对于  $j \in \{\mathcal{D}(\Phi) + 1, \dots, K-1\}$ ,  $F_K(x) := (\mathbb{I}_{d_2} - \mathbb{I}_{d_2})x$ , 则有

$$\Phi = F_{\mathcal{D}(\Phi)} \circ \sigma \circ F_{\mathcal{D}(\Phi)-1} \circ \sigma \circ \cdots \circ \sigma \circ F_1 \quad (3-5)$$

如下网络

$$\Psi := F_K \circ \sigma \circ F_{K-1} \circ \sigma \circ \cdots \circ \sigma \circ F_{\mathcal{D}(\Phi)+1} \circ \sigma \circ \begin{pmatrix} F_{\mathcal{D}(\Phi)} \\ -F_{\mathcal{D}(\Phi)} \end{pmatrix} \circ \sigma \circ F_{\mathcal{D}(\Phi)-1} \circ \sigma \circ \cdots \circ \sigma \circ F_1 \quad (3-6)$$

满足声明的特性。

简单起见, 只针对深度相同的网络提出以下两个引理, 在引理 3.2 的直接应用之后, 就可以推广到一般情况。仅针对相同深度的网络陈述以下两个引理, 对一般情况的扩展遵循引理 3.2 的直接应用。这两个引理中式(3-1)和式(3-5)给出了神经网络并行化的概念, 具

体来说是结合神经网络实现函数  $f$  和  $g$  到神经网络的映射,即  $x \mapsto (f(x), g(x))$ 。

**【引理 3.3】** 令  $n, L \in \mathbb{N}$ , 且对于  $i \in \{1, 2, \dots, n\}$ , 令  $d_i, d'_i \in \mathbb{N}$ , 且  $\Phi_i \in \xi_{(d_i, d'_i)}$ ,  $\mathcal{D}(\Phi_i) = L$ 。存在网络  $\Psi \in \xi_{\sum_{i=1}^n d_i, \sum_{i=1}^n d'_i}$ , 且有

$$\mathcal{D}(\Phi_i) = L, \mathcal{M}(\Psi) = \sum_{i=1}^n \mathcal{M}(\Phi_i), \mathcal{W}(\Psi) = \sum_{i=1}^n \mathcal{W}(\Phi_i), A(\Psi) = \max_i A(\Phi_i)$$

对于任意的  $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^{\sum_{i=1}^n d_i}$ ,  $x_i \in \mathbb{R}^{d_i}, i \in \mathbb{N}$ , 满足

$$\Psi(\mathbf{x}) = (\Phi_1(x_1), \Phi_2(x_2), \dots, \Phi_n(x_n)) \in \mathbb{R}^{\sum_{i=1}^n d'_i} \quad (3-7)$$

证明: 设网络  $\Phi_i$  为

$$\Phi_i = F_L^i \circ \sigma \circ F_{L-1}^i \circ \sigma \circ \dots \circ \sigma \circ F_1^i \quad (3-8)$$

其中  $F_l^i(x) = w_l^i x + b_l^i$ 。进一步定义  $\Phi_i$  的层维度为  $N_0^i, N_1^i, \dots, N_L^i$ , 且令

$$N_l := \sum_{i=1}^n N_l^i, \quad l \in \{0, 1, \dots, L\}$$

那么, 对于任意的  $l \in \{0, 1, \dots, L\}$ , 定义分块对角矩阵

$$\mathbf{w}_l := \text{diag}(w_l^1, w_l^2, \dots, w_l^n)$$

向量  $\mathbf{b}_l = (b_l^1, b_l^2, \dots, b_l^n)$ , 仿射变换  $F_l := \mathbf{w}_l \mathbf{x} + \mathbf{b}_l$ 。那么有如下的网络

$$\Psi := F_L \circ \sigma \circ F_{L-1} \circ \sigma \circ \dots \circ \sigma \circ F_1 \quad (3-9)$$

满足声明的特性, 得证。

至此, 已阐述完形式化神经网络线性组合的概念。

**【引理 3.4】** 令  $n, L, d' \in \mathbb{N}$ , 且对于  $i \in \{1, 2, \dots, n\}$ , 令  $d_i \in \mathbb{N}, a_i \in \mathbb{R}$ , 有  $\Phi_i \in \xi_{d_i, d'}$  满足  $\mathcal{D}(\Phi_i) = L$ 。那么, 存在一个网络  $\Psi \in \xi_{\sum_{i=1}^n d_i, d'}$  满足

$$\mathcal{D}(\Psi) = L, \mathcal{M}(\Psi) \leq \sum_{i=1}^n \mathcal{M}(\Phi_i), \mathcal{W}(\Psi) \leq \sum_{i=1}^n \mathcal{W}(\Phi_i), \mathcal{B}(\Psi) = \max_i \{|a_i| \mathcal{B}(\Phi_i)\}$$

则对于任意的  $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^{\sum_{i=1}^n d_i}$ ,  $x_i \in \mathbb{R}^{d_i}, i \in \{1, 2, \dots, n\}$  满足

$$\Psi(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^n a_i \Phi_i(x_i) \in \mathbb{R}^{d'} \quad (3-10)$$

证明: 用引理 3.3 的结构来证明, 用  $(a_1 w_L^1, a_2 w_L^2, \dots, a_n w_L^n)$  代替  $\mathbf{w}_L$ ,  $\sum_{i=1}^n a_i b_L^i$  代替  $\mathbf{b}_L$ , 得到的网络满足要求的性质。

## 3.2 乘法、多项式、光滑函数的逼近

首先推导神经网络近似平方函数。以此为基础, 构建对乘法函数的近似, 然后进行多项式和一般平滑函数的近似<sup>①</sup>。首先引入“锯齿”函数完成相关函数的逼近网络构造。考虑函

<sup>①</sup> 本章神经网络基础元素的符号化定义等主要基于文献 *Deep neural network approximation theory*。

数  $h: \mathbb{R} \rightarrow [0, 1]$ , 有

$$h(x) = 2\sigma(x) - 4\sigma\left(x - \frac{1}{2}\right) + 2\sigma(x - 1) = \begin{cases} 2x, & 0 \leq x < \frac{1}{2} \\ 2(1-x), & \frac{1}{2} \leq x \leq 1 \\ 0, & \text{其他} \end{cases} \quad (3-11)$$

令  $h_0(x) = x, h_1(x) = h(x)$ ,  $s$  阶锯齿函数  $h_s$  作为函数  $h$  的  $s$  折构成, 即

$$h_s := \underbrace{h \circ h \circ \cdots \circ h}_s, \quad s \geq 2 \quad (3-12)$$

注意  $h$  能够通过 2 层网络  $\Phi_h \in \xi_{(1,1)}$  实现, 根据  $\Phi_h := F_2 \circ \sigma \circ F_1 = h$ , 其中

$$F_1(x) = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} x - \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{1}{2} \\ 1 \end{pmatrix}, \quad F_2(x) = \begin{pmatrix} 2 & -4 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} \quad (3-13)$$

因此  $s$  阶锯齿函数  $h_s$  能够通过网络  $\Phi_h^s \in \xi_{(1,1)}$  实现, 即

$$\Phi_h^s := F_2 \circ \sigma \circ \underbrace{F_h \circ \sigma \circ \cdots \circ F_h \circ \sigma}_{s-1} \circ F_1 = h_s \quad (3-14)$$

其中,

$$F_h(x) = \begin{pmatrix} 2 & -4 & 2 \\ 2 & -4 & 2 \\ 2 & -4 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{1}{2} \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3-15)$$

下面对频繁用到的  $h_s(x)$  的自相似性和对称特性进行总结。

**【引理 3.5】** 对于  $s \in \mathbb{N}, k \in \{0, 1, \dots, 2^{s-1} - 1\}$ ,  $h(2^{s-1} - k)$  包含在区间

$\left[\frac{k}{2^{s-1}}, \frac{k+1}{2^{s-1}}\right]$  内, 有

$$h_s(x) = \sum_{k=0}^{2^{s-1}-1} h(2^{s-1}x - k), \quad x \in [0, 1]$$

且

$$h_s\left(\frac{k}{2^{s-1}} + x\right) = h_s\left(\frac{k+1}{2^{s-1}} - x\right), \quad x \in \left[0, \frac{1}{2^{s-1}}\right]$$

### 3.2.1 乘法函数的逼近

本节首先阐述深度 ReLU 网络对平方函数的逼近, 据此构造对乘法函数的逼近。

**【命题 3.1】** 对于任意的常数  $C > 0$ , 存在  $\epsilon \in \left(0, \frac{1}{2}\right)$ , 有网络

$$\{\Phi_\epsilon \in \xi_{(1,1)} \mid \mathcal{D}(\Phi_\epsilon) \leq C \log(\epsilon^{-1}), \mathcal{W}(\Phi_\epsilon) = 3, \mathcal{A}(\Phi_\epsilon) \leq 1, \Phi_\epsilon(0) = 0\}$$

满足

$$\|\Phi_\epsilon(x) - x^2\|_{L^\infty([0,1])} \leq \epsilon \quad (3-16)$$

**证明:** 基于以两个基本的观察结果。

(1) 关于函数  $f(x) = x - x^2$  在点  $\frac{j}{2^k}, j \in \{0, 1, \dots, 2^k\}$  处的线性插值  $I_k: [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}$ ,  $k \in \mathbb{N}$ , 尤其是其细化步骤  $I_k \rightarrow I_{k+1}$  的自相似性。对于任意  $k \in \mathbb{N}$ , 残差  $f - I_k$  在每一个插值的两点之间的区间是相同的。具体地, 将  $f_k: [0, 2^{-k}] \rightarrow [0, 2^{-2k-2}]$  定义为  $f_k(x) = 2^{-k}x - x^2$ , 并且考虑它的线性插值  $g_k: [0, 2^{-k}] \rightarrow [0, 2^{-2k-2}]$  在区间  $[0, 2^{-m}]$  的中间点和结尾点处有

$$g_k(x) := \begin{cases} 2^{-k-1}x, & x \in [0, 2^{-k-1}] \\ -2^{-k-1}x + 2^{-2k-1}, & x \in [2^{-k-1}, 2^{-k}] \end{cases} \quad (3-17)$$

直接计算可得到

$$f_k(x) - g_k(x) = \begin{cases} f_{k+1}(x), & x \in [0, 2^{-k-1}] \\ f_{k+1}(x - 2^{-k-1}), & x \in [2^{-k-1}, 2^{-k}] \end{cases} \quad (3-18)$$

令  $f = f_0$  和  $I_1 = g_0$ , 对于任意的  $k \in \mathbb{N}$ , 有

$$f(x) - I_k(x) = f_k\left(x - \frac{m}{2^k}\right), \quad x \in \left[\frac{m}{2^k}, \frac{m+1}{2^k}\right], \quad m \in \{0, 1, \dots, 2^k - 1\} \quad (3-19)$$

并且  $I_k = \sum_{j=0}^{k-1} G_j$ , 其中,  $G_j: [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}$ , 则

$$G_j(x) = g_j\left(x - \frac{m}{2^j}\right), \quad x \in \left[\frac{m}{2^j}, \frac{m+1}{2^j}\right], \quad m \in \{0, 1, \dots, 2^j - 1\} \quad (3-20)$$

因此, 有

$$\sup_{x \in [0, 1]} |x - (x - I_k(x))| = \sup_{x \in [0, 1]} |f(x) - I_k(x)| = \sup_{x \in [0, 2^{-k}]} |f_k(x)| = 2^{-2k-2} \quad (3-21)$$

(2) 观察结果是基于上面描述的锯齿构造。根据它, 通过每一层中两个神经元的第  $j$  层网络容易得到  $G_j$  的实现; 第三个神经元能被使用实现  $x - I_k(x)$  到  $x^2$  的近似。具体地, 记

$$s_j(x) = 2^{-1}\sigma(x) - \sigma(x - 2^{-2j-1})$$

对于  $x \in [0, 1]$ ,  $G_0 = s_0$ , 可得  $G_j = s_j \circ G_{j-1}$ 。据此, 能够构建一个网络实现  $x - I_k(x), x \in [0, 1]$

$$\mathbf{w}_l = \begin{pmatrix} 2^{-1} & -1 & 0 \\ 2^{-1} & -1 & 0 \\ -2^{-1} & 1 & 1 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{3 \times 3}, \quad \mathbf{b}_l = \begin{pmatrix} 0 \\ -2^{-2l+1} \\ 0 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^3, \quad l \in \{2, 3, \dots, k\} \quad (3-22)$$

并且  $\mathbf{w}_{k+1} = (-2^{-1}, 1, 1) \in \mathbb{R}^{1 \times 3}, \mathbf{b}_{k+1} = \mathbf{0}$ 。设  $F_l(x) = \mathbf{w}_l x + \mathbf{b}_l, l \in \{1, 2, \dots, k+1\}$ , 有

$$\Phi_k = F_{k+1} \circ \sigma \circ F_k \circ \sigma \circ \dots \circ \sigma \circ F_1 \quad (3-23)$$

直接计算可得  $\Phi_k(x) = x - \sum_{j=0}^{k-1} G_j(x), x \in [0, 1]$ 。网络  $\Phi_\epsilon := \Phi_{\lceil \frac{\log(\epsilon^{-1})}{2} \rceil - 1}$  满足声明特性, 得证。

根据引理 3.5 中  $h_s(x)$  的对称性, 其导致命题 3.1 证明中的插值错误, 由于每个区间间隔都是相同的, 最大误差出现在各个区间的中心。然而, 逼近神经网络在随着网络深度呈指数增长的多个点上实现线性插值。

**【引理 3.6】** 令  $k \in \mathbb{N}$ , 函数  $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  如果是不超过  $k$  块的分段线性, 则称其为  $k$  锯齿函数, 即域  $\mathbb{R}$  可以划分为  $k$  个区间, 使得  $f$  在这些区间中的每一个上都是线性的。

可知, 锯齿函数构造中的线性区域的数量随着网络深度增加呈指数级增长能够最优消除这种误差。值得强调的是, 本章发展的理论与这种最优特性紧密相关。然而, 网络权重通过训练获取, 在这个意义上, 这种特性又是脆弱的, 通常线性区域的数量并没有随着网络深度呈指数级增加。有文献提出了一个神经网络训练方法尝试避免这个问题。理解在通常的神经网络中线性区域的数量怎样增长, 并量化其影响(可能是指数的), 是神经网络的逼近理论基础限制方面一个公开的问题。

构建在区间  $[-S, S]$  上近似乘法函数的网络, 将用到对  $x^2$  的近似结果, 极化等式

$$xy = \frac{1}{4}((x+y)^2 - (x-y)^2), \quad \sigma(x) + \sigma(-x) = |x|$$

以及 ReLU 函数正齐次的缩放性质, 即  $\sigma(\theta x) = \theta \sigma(x), \theta \geq 0, x \in \mathbb{R}$ 。

**【命题 3.2】** 对于任意的常数  $C > 0$ , 存在  $S \in \mathbb{R}_+$  和  $\epsilon \in (0, \frac{1}{2})$ , 有网络

$\{\Phi_{S,\epsilon} \in \xi_{(2,1)} \mid \mathcal{D}(\Phi_{S,\epsilon}) \leq C(\log(\lceil S \rceil) + \log(\epsilon^{-1})), \mathcal{W}(\Phi_{S,\epsilon}) \leq 5, \mathcal{A}(\Phi_{S,\epsilon}) \leq 1\}$   
满足  $\Phi_{S,\epsilon}(0, x) = \Phi_{S,\epsilon}(x, 0), x \in \mathbb{R}$ , 且

$$\|\Phi_{S,\epsilon}(x, y) - xy\|_{L^\infty([-S, S]^2)} \leq \epsilon \quad (3-24)$$

**证明:** 不失一般性, 对于  $S < 1$ , 简单地构建  $S = 1$  的网络就能保证声明的特性。对于  $S \geq 1$ , 证明基于上面提到的极化等式。根据命题 3.1 构建两个平方网络, 它们共享加和  $G_j$  的神经元, 加上一层从  $(x, y)$  到  $(\frac{|x+y|}{2S}, \frac{|x-y|}{2S})$  的映射, 然后通过以 1 为界的权重实现与  $S^2$  相乘的层。具体地, 考虑关于矩阵  $w_i$  和偏置  $b_i$  的网络  $\Psi_k$ ,

$$w_1 := \frac{1}{2S} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & -1 \\ 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{4 \times 2}, \quad b_1 := \mathbf{0} \in \mathbb{R}^4$$

$$w_2 := \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{5 \times 4}$$

$$b_2 := \begin{pmatrix} 0 \\ -2^{-1} \\ 0 \\ 0 \\ -2^{-1} \end{pmatrix}$$

$$w_i := \begin{pmatrix} 2^{-1} & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 2^{-1} & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 2^{-1} & 1 & 1 & 2^{-1} & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 2^{-1} & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 2^{-1} & -1 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{5 \times 5}$$

$$\mathbf{b}_i := \begin{pmatrix} 0 \\ -2^{-1i+3} \\ 0 \\ -2^{-1i+3} \end{pmatrix}, \quad l \in \{3, 4, \dots, k+1\}$$

$$\mathbf{w}_{k+2} := (-2^{-1}, 1, 1, 2^{-1}, -1) \in \mathbb{R}^{1 \times 5}, \quad \mathbf{b}_{k+2} := \mathbf{0}$$

结合命题 3.1 证明中定义的  $G_j$  和  $\Phi_k$ , 直接计算可得

$$\begin{aligned} \Psi_k(x, y) &= \left( \frac{|x+y|}{2S} - \sum_{j=0}^{k-1} G_j \frac{|x+y|}{2S} \right) - \left( \frac{|x-y|}{2S} - \sum_{j=0}^{k-1} G_j \frac{|x-y|}{2S} \right) \\ &= \Phi_k \left( \frac{|x+y|}{2S} \right) - \Phi_k \left( \frac{|x-y|}{2S} \right) \end{aligned} \quad (3-25)$$

结合式(3-21)得

$$\begin{aligned} & \sup_{(x,y) \in [-S,S]^2} \left| \Psi_2(x,y) - \frac{xy}{S^2} \right| \\ &= \sup_{(x,y) \in [-S,S]^2} \left| \left( \Phi_k \left( \frac{|x+y|}{2S} \right) - \Phi_k \left( \frac{|x-y|}{2S} \right) \right) - \left( \left( \frac{|x+y|}{2S} \right)^2 - \left( \frac{|x-y|}{2S} \right)^2 \right) \right| \\ &\leq 2 \sup_{z \in [0,1]} |\Phi_k(z) - z^2| = 2^{-2k-1} \end{aligned} \quad (3-26)$$

根据引理 3.6, 令  $\Psi_S(x) = S^2 x$  为标量乘法网络, 且

$$\Phi_{S,\epsilon} := \Psi_S \circ \Psi_{k(S,\epsilon)}$$

其中

$$k(S, \epsilon) := \lceil 2^{-1} (1 + \log(S^2 \epsilon^{-1})) \rceil$$

然后, 式(3-24)直接由式(3-26)得到, 且引理 3.1 建立深度、宽度和权重大小的所需边界。最后, 直接从式(3-25)得到

$$\Phi_{S,\epsilon}(0, x) = \Phi_{S,\epsilon}(x, 0) = 0, \quad \forall x \in \mathbb{R}$$

注意, 上述构建的乘法网络的权重以 1 为界, 与域的大小  $S$  无关。这是根据引理 3.6 通过权衡网络深度得到权重大小实现的。

### 3.2.2 多项式函数的逼近

下面阐述多项式的近似问题, 该问题受实现多项式线性组合的网络的影响, 而多项式的线性组合又由乘法网络构成。

**【命题 3.3】** 存在常数  $C > 0$ , 对于任意的  $k \in \mathbb{N}$ ,  $\mathbf{a} = (a_i)_{i=0}^k \in \mathbb{R}^{k+1}$ ,  $S \in \mathbb{R}_+$  和  $\epsilon \in (0, \frac{1}{2})$ , 存在网络

$$\{ \Phi_{a,S,\epsilon} \in \mathfrak{E}_{(1,1)} \mid \mathcal{D}(\Phi_{a,S,\epsilon}) \leq Ck(\log(\epsilon^{-1}) + k \log(\lceil S \rceil) + \log(k) + \log(\lceil \|\mathbf{a}\|_\infty \rceil)) \}$$

$$\mathcal{W}(\Phi_{a,S,\epsilon}) \leq 9, \quad \mathcal{A}(\Phi_{a,S,\epsilon}) \leq 1 \}$$

满足

$$\left\| \Phi_{a,S,\epsilon}(x) - \sum_{i=0}^k a_i x^i \right\|_{L^\infty([-S,S])} \leq \epsilon \quad (3-27)$$

**证明:** 如命题 3.2 中的证明, 只需考虑  $S \geq 1$  的情况。对于  $k=1$ , 进行仿射变换, 并可

直接从推论 3.2 得到。对于  $k \geq 2$  的证明通过实现单项式  $x^m$ ,  $m \geq 2$  并联合乘法网络的迭代组合。其中使用网络实现  $x^m$  的构建不仅作为网络实现  $x^{m+1}$  的构建块, 而且用来并行

化逼近级数和  $\sum_{i=0}^m a_i x^i$ 。

首先设

$$A_m = A_m(S, \mu) := \lceil S \rceil^m + \mu \sum_{s=0}^{m-2} \lceil S \rceil^s, \quad m \in \mathbb{N}, \mu \in \mathbb{R}_+$$

令  $\Phi_{A_j, \mu}$  为命题 3.2 中的乘法网络。然后, 定义如下递归函数

$$f_{m,S,\mu}(x) = \Phi_{A_{m-1}, \mu}(x, f_{m-1}, S, \mu(x)), \quad m \geq 2 \quad (3-28)$$

其中,  $f_{0,S,\mu}(x) = 1$  且  $f_{1,S,\mu}(x) = x$ 。为了简化符号, 后面使用缩写  $f_m = f_{m,S,\mu}$ 。首先, 验证  $f_{m,S,\mu}$  可以很好地近似单项式。具体来说, 用归纳法证明如下:

$$\|f_m(x) - x^m\|_{L^\infty([-S,S])} \leq \mu \sum_{s=0}^{m-2} \lceil S \rceil^s, \quad \forall m \geq 2 \quad (3-29)$$

对于基础情形  $m=2$  直接从命题 3.2 中得到, 也就是

$$\|f_2(x) - x^2\|_{L^\infty([-S,S])} = \|\Phi_{(A_1, \mu)}(x, x) - x^2\|_{L^\infty([-S,S])} \leq \mu \quad (3-30)$$

注意  $S \leq A_1 = \lceil S \rceil$  (当在  $A_m$  的定义中求和的上限为负时, 让求和等于 0)。

继续使用归纳假设建立归纳步骤  $(m-1) \rightarrow m$ ,

$$\|f_{m-1}(x) - x^{m-1}\|_{L^\infty([-S,S])} \leq \mu \sum_{s=0}^{m-3} \lceil S \rceil^s \quad (3-31)$$

由于

$$\|f_{m-1}\|_{L^\infty([-S,S])} = \|x^{m-1}\|_{L^\infty([-S,S])} + \|f_{m-1}(x) - x^{m-1}\|_{L^\infty([-S,S])} \leq A_{m-1} \quad (3-32)$$

应用命题 3.2 可得

$$\begin{aligned} \|f_m(x) - x^m\|_{L^\infty([-S,S])} &\leq \|f_m(x) - x f_{m-1}(x)\|_{L^\infty([-S,S])} + \|x f_{m-1}(x) - x^m\|_{L^\infty([-S,S])} \\ &\leq \|\Phi_{A_{m-1}, \mu}(x, f_{m-1}(x)) - x f_{m-1}(x)\|_{L^\infty([-S,S])} + \\ &\quad S \|f_{m-1}(x) - x^{m-1}\|_{L^\infty([-S,S])} \\ &\leq \mu + \lceil S \rceil \mu \sum_{s=0}^{m-3} \lceil S \rceil^s, \end{aligned} \quad (3-33)$$

归纳法完成。

现在构建网络  $\Phi_{a,S,\varepsilon}$  近似多项式  $\sum_{i=0}^k a_i x^i$ 。存在常数  $C'$ , 对于任意的

$$k \geq 2, \mathbf{a} = (a_i)_{i=0}^k \in \mathbb{R}^{k+1}, \quad i \in \{1, 2, \dots, k-1\}$$

存在一个网络  $\Psi_{a,S,\mu} \in \xi_{(3,3)}$  满足

$|\mathcal{D}(\Psi_{a,S,\mu}^i)| \leq C'(\log(\mu^{-1}) + \log(\lceil A_i \rceil) + \log(\|\mathbf{a}\|_\infty)), \mathcal{W}(\Psi_{a,S,\mu}^i) \leq 9, \quad \mathcal{A}(\Psi_{a,S,\mu}^i) \leq 1$   
且满足

$$\Psi_{a,S,\mu}^i(x, s, y) = (x, s + a_i y, \Phi_{A_i, \mu}(x, y)) \quad (3-34)$$

为了验证这一点, 考虑下面的映射链

$$\begin{aligned}
 (x, s, y) &\xrightarrow{\text{I}} (x, s, y, y) \xrightarrow{\text{II}} (x, s + a_i y, y) \xrightarrow{\text{III}} \\
 &(x, s + a_i y, x, y) \xrightarrow{\text{IV}} (x, s + a_i y, \Phi_{A_i, \mu}(x, y)). \quad (3-35)
 \end{aligned}$$

注意到映射 I 是系数在  $\{0, 1\}$  之间的仿射变换, 可以简单地把它看作深度为 1 的网络。使用推论 3.2 实现权重以 1 为界的仿射变换  $(s, y) \mapsto s + a_i y$  可以获取映射 II, 然后应用引理 3.2 和映射 II。将该网络与两个网络并行, 根据  $x = \sigma(x) - \sigma(-x)$  实现该恒等映射。映射 III 的获取通过同样的方式, 将映射 II 结果与另一个网络并行实现该恒等映射。最后, 通过将网络  $\Phi_{A_i, \mu}$  与两个恒等网络并行实现映射 IV。根据引理 3.1 构建 4 个网络可得网络  $\Psi_{a, S, \mu}^i, i \in \{1, 2, \dots, k-1\}$ , 满足声明的特性。应用推论 3.2 可得网络  $\Psi_{a, S, \mu}^0$ , 实现  $x \mapsto (x, a_0, x)$ , 并通过网络  $\Psi_{a, S, \mu}^k$  实现  $(x, s, y) \mapsto s + a_k y$ 。

令

$$\mu = \mu(a, S, \epsilon) := (\|a\|_{\infty} (k-1)^2 \lceil S \rceil^{k-2})^{-1} \epsilon$$

且定义

$$\Phi_{a, S, \epsilon} := \Psi_{a, S, \mu}^k \circ \Psi_{a, S, \mu}^{k-1} \circ \dots \circ \Psi_{a, S, \mu}^1 \circ \Psi_{a, S, \mu}^0 \quad (3-36)$$

直接计算可得

$$\Phi_{a, S, \epsilon} = \sum_{i=0}^k a_i f_{i, S, \mu} \quad (3-37)$$

因此式(3-29)意味着

$$\begin{aligned}
 \left\| \Phi_{a, S, \epsilon}(x) - \sum_{i=0}^k a_i x_i \right\|_{L^{\infty}([-S, S])} &\leq \sum_{i=0}^k |a_i| \|f_{i, S, \mu}(x) - x_i\|_{L^{\infty}([-S, S])} \\
 &\leq \sum_{i=0}^k |a_i| \left( \mu \sum_{s=0}^{i-2} \lceil S \rceil^s \right) \\
 &\leq \|a\|_{\infty} \mu \sum_{m=0}^{k-2} (k-1-m) \lceil S \rceil^m \\
 &\leq \|a\|_{\infty} (k-1)^2 \lceil S \rceil^{k-2} \mu \\
 &= \epsilon \quad (3-38)
 \end{aligned}$$

对于一个适当选择的绝对常数  $C$ , 通过引理 3.1 建立  $\mathcal{W}(\Phi_{a, S, \epsilon}) \leq 9, \mathcal{A}(\Phi_{a, S, \epsilon}) \leq 1$ , 有

$$\begin{aligned}
 \mathcal{D}(\Phi_{(a, S, \epsilon)}) &\leq \sum_{i=0}^k \mathcal{D}(\Psi_{(a, S, \mu)}^i) \\
 &\leq 2(\log(\lceil \|a\|_{\infty} \rceil) + 5) + \sum_{i=1}^{k-1} C'(\log(\mu^{-1}) + \log(\lceil A_{i-1} \rceil) + \log(\lceil \|a\|_{\infty} \rceil)) \\
 &\leq Ck(\log(\epsilon^{-1}) + k \log(\lceil S \rceil) + \log k + \log(\lceil \|a\|_{\infty} \rceil)) \quad (3-39)
 \end{aligned}$$

证毕。

Weierstrass 逼近定理指出, 闭区间上的每个连续函数可以通过多项式以任意精度逼近。

**【定理 3.1】** 令  $[a, b] \subseteq \mathbb{R}, f \in C([a, b])$ , 那么对于任意的  $\epsilon > 0$ , 存在一个多项式  $\pi$ , 满足

$$\|f - \pi\|_{L^{\infty}([a, b])} \leq \epsilon \quad (3-40)$$

从命题 3.3 可得出结论,闭区间上的每个连续函数都可以通过宽度不超过 9 的深度 ReLU 网络以任意精度逼近,这相当于对于有限宽深度 ReLU 网络的通用逼近定理的变体。通过将命题 3.3 应用于具有切比雪夫点的拉格朗日插值,可以获取逼近(非常)光滑函数的网络,并可显式地定量其宽度、深度和权重边界。

### 3.2.3 光滑函数的逼近

基于前面的结论和定理,本节主要介绍深度 ReLU 网络对光滑函数的逼近。

**【引理 3.7】** 考虑集合

$$V_{[-1,1]} := \{f \in C^\infty([-1,1], \mathbb{R}) : \|f^{(n)}(x)\|_{L^\infty([-1,1])} \leq n!, \forall n \in \mathbb{N}_0\} \quad (3-41)$$

存在常数  $C > 0$ , 对于任意的  $f \in V_{[-1,1]}$  和  $\epsilon \in (0, \frac{1}{2})$ , 存在网络

$$\{\Psi_{f,\epsilon} \in \xi_{(1,1)} \mid \mathcal{D}(\Psi_{f,\epsilon}) \leq C(\log(\epsilon^{-1}))^2, \mathcal{W}(\Psi_{f,\epsilon}) \leq 9, \mathcal{A}(\Psi_{f,\epsilon}) \leq 1\}$$

满足

$$\|\Psi_{f,\epsilon} - f\|_{L^\infty([-1,1])} \leq \epsilon \quad (3-42)$$

**证明:** 一个关于切比雪夫点的拉格朗日插值的基本结果确保,对于任意的  $f \in V_{[-1,1]}$ ,  $k \in \mathbb{N}$ , 存在  $k$  阶多项式  $P_{f,k}$  满足

$$\|f - P_{f,k}\|_{L^\infty([-1,1])} \leq \frac{1}{2^k(k+1)!} \|f^{(k+1)}\|_{L^\infty([-1,1])} \leq \frac{1}{2^k} \quad (3-43)$$

注意,根据  $P_{f,k} = \sum_{j=0}^k c_{f,k,j} T_j(x)$ ,  $|c_{f,k,j}| \leq 2$  和通过两项递归定义的切比雪夫多项式

$$T_j(x) = 2xT_{j-2}(x), \quad j \geq 2, T_0(x) = 1, \quad T_1(x) = x$$

可以表示为切比雪夫基。此外,使用这个递归可得出多项式基上  $T_m$  的系数的上界为  $3^m$ 。

因此,根据  $P_{f,k} = \sum_{j=0}^k a_{f,k,j} x^j$  可表达  $P_{f,k}$  为

$$A_{f,k} := \max_{j=0,1,\dots,k} |a_{f,k,j}| \leq 2(k+1)3^k \quad (3-44)$$

将命题 3.3 应用于单项式基中的  $P_{f,k}$ , 且有  $k = \left\lceil \log\left(\frac{2}{\epsilon}\right) \right\rceil$  和逼近误差  $\epsilon/2$ , 那么对于某个绝对常数  $C$ , 满足

$$C'k(\log(2/\epsilon) + \log(k) + \log(|A_{f,k}|)) \leq C(\log(\epsilon^{-1}))^2 \quad (3-45)$$

证毕。

引理 3.6 中提供了引理 3.7 对一般区间近似的扩展。而引理 3.7 表明,一类特定的  $C^\infty$ -函数,即那些导数适当有界的函数可以由神经网络近似,该近似网络的连通性在  $\epsilon^{-1}$  内呈多对数增长,事实证明这并适用于一般  $m$  次可微函数。

## 3.3 正余弦函数的逼近

本节阐述深度网络对正余弦函数的近似。深度神经网络逼近振荡函数的基本思想,本质上是利用锯齿构造实现线性区域的数量随着网络深度呈指数级增长的最优性。图 3-3 展示了使用锯齿函数完成余弦函数的构造,其结合余弦函数和锯齿函数的对称性,从而产生随

网络深度呈指数增长的振荡行为。

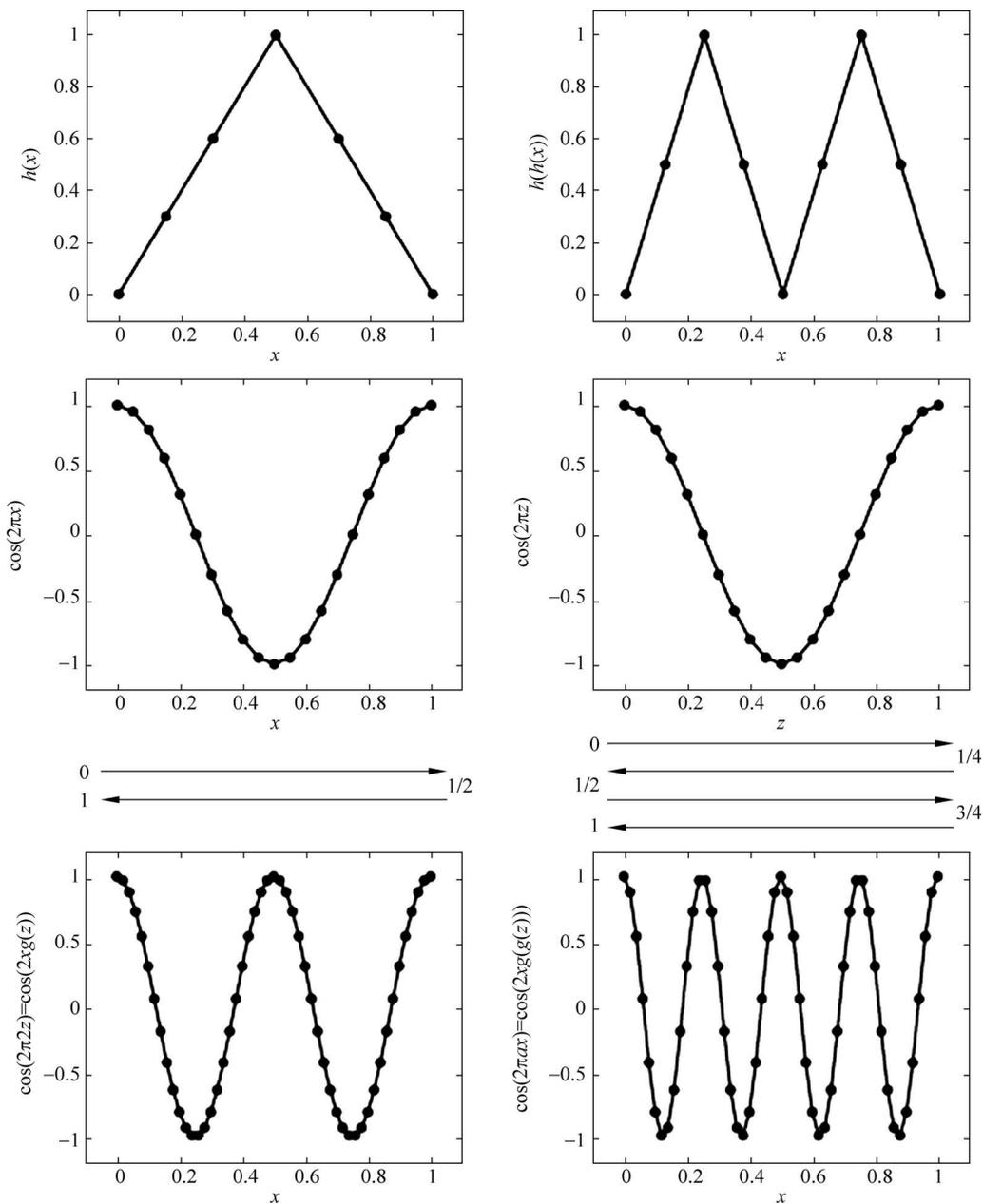


图 3-3 定理 3.1 使用式(3-12)所示的函数  $h_s(x)$  构造对  $\cos(2\pi ax)$  函数的逼近

### 3.3.1 余弦函数的逼近

基于以上深度神经网络逼近振荡函数的基本思想,本节具体阐述深度神经网络逼近余弦函数。

**【定理 3.2】** 对于任意的常数  $C > 0$ , 存在  $a, S \in \mathbb{R}_+$ ,  $\epsilon \in (0, \frac{1}{2})$ , 有网络

$$\{\Psi_{a,S,\epsilon} \in \xi_{(1,1)} \mid \mathcal{D}(\Psi_{a,S,\epsilon}) \leq C((\log(\epsilon^{-1}))^2 + \log(\lceil aS \rceil)), \mathcal{W}(\Psi_{a,S,\epsilon}) \leq 9, \mathcal{A}(\Psi_{a,S,\epsilon}) \leq 1\}$$

满足

$$\| \Psi_{a,S,\epsilon}(x) - \cos(ax) \|_{L^\infty([-S,S])} \leq \epsilon \quad (3-46)$$

**证明:** 注意  $f(x) := (6/\pi^3)\cos(\pi x)$  在  $V_{[-1,1]}$  中。因此,由引理 3.6 可知,存在一个常数  $C > 0$ , 对于任意的  $\epsilon \in (0, \frac{1}{2})$ , 存在网络  $\{\Phi_\epsilon \in \xi_{(1,1)} \mid \mathcal{D}(\Phi_\epsilon) \leq C(\log(\epsilon^{-1}))^2, \mathcal{W}(\Phi_\epsilon) \leq 9, \mathcal{A}(\Phi_\epsilon) \leq 1\}$ , 且满足

$$\| \Phi_\epsilon - f \|_{L^\infty([-1,1])} \leq \frac{6}{\pi^3}\epsilon \quad (3-47)$$

将此结果扩展到在区间  $[-1,1]$  上对  $x \mapsto \cos(ax), a \in \mathbb{R}_+$  的近似。这将通过利用  $x \mapsto \cos(ax)$  是 2 周期偶函数来实现。令  $h_s: [0,1] \rightarrow [0,1], s \in \mathbb{N}$ , 为式(3-12)中定义的  $s$  阶锯齿函数, 且注意由于余弦函数的周期性和对称性, 对于任意的  $s \in \mathbb{N}_0, x \in [-1,1]$ , 有

$$\cos(\pi 2^s x) = \cos(\pi h_s(|x|)) \quad (3-48)$$

对于  $a > \pi$ , 定义

$$s = s(a) := \lceil \log a - \log \pi \rceil$$

$$\beta = \beta(a) := (\pi 2^s)^{-1} a \in \left(\frac{1}{2}, 1\right]$$

且

$$\cos(ax) = \cos(\pi 2^s \beta x) = \cos(\pi h_s(\beta |x|)), \quad x \in [-1,1] \quad (3-49)$$

对于  $h_s(\beta |x|) \in [0,1]$ , 由式(3-47)可得

$$\left\| \frac{\pi^3}{6} \Phi_\epsilon(h_s(\beta |x|)) - \cos(ax) \right\|_{L^\infty([-1,1])} = \frac{\pi^3}{6} \| \Phi_\epsilon(h_s(\beta |x|)) - f(h_s(\beta |x|)) \|_{L^\infty([-1,1])} \leq \epsilon \quad (3-50)$$

为了将  $\Phi_\epsilon(h_s(\beta |x|))$  实现为神经网络, 从式(3-14)中定义的网络  $\Phi_h^s$  开始, 应用引理 3.5 转化它们为网络

$$\Psi_h^s(x) = h_s(x), \quad x \in [0,1]$$

满足  $\mathcal{A}(\Psi_h^s) \leq 1, \mathcal{D}(\Psi_h^s) = 7(s+1), \mathcal{W}(\Psi_h^s) = 3$ 。接着, 令

$$\Psi(x) := \beta \sigma(x) - \beta \sigma(-x) = \beta |x|$$

且  $\Phi_{\pi^3/6}^{\text{mult}}$  为引理 3.8 中的标量乘法网络。注意

$$\Psi_{a,\epsilon} := \Phi_{\pi^3/6}^{\text{mult}} \circ \Phi_\epsilon \circ \Psi_h^s \circ \Psi = \Phi_\epsilon(h_s(\beta |x|))$$

从引理 3.1 可得

$$\mathcal{D}(\Psi_{a,\epsilon}) \leq C((\log(\epsilon^{-1}))^2 + \log(\lceil a \rceil)), \mathcal{W}(\Psi_{a,\epsilon}) \leq 9, \mathcal{A}(\Psi_{a,\epsilon}) \leq 1$$

联合式(3-50), 建立对于  $a > \pi$  和区间  $[-1,1]$  上的期望结果的近似。对于  $a \in (0, \pi)$ , 由  $x \mapsto \cos(6/\pi^3)$  在区间  $V_{[-1,1]}$  上可得

$$\Psi_{a,\epsilon} := \Phi_{\pi^3/6}^{\text{mult}} \circ \Phi_\epsilon$$

最后, 对于任意的  $S \geq 1$ , 考虑区间  $[-S,S]$  上  $x \mapsto \cos(ax)$  的近似。为此, 定义网络

$$\Psi_{a,S,\epsilon}(x) := \Psi_{a,S,\epsilon}\left(\frac{x}{S}\right)$$

并由此可得

$$\begin{aligned} \sup_{x \in [-S,S]} | \Psi_{a,S,\epsilon}(x) - \cos(ax) | &= \sup_{y \in [-1,1]} | \Psi_{a,S,\epsilon}(Sy) - \cos(aSy) | \\ &= \sup_{x \in [-1,1]} | \Psi_{a,S,\epsilon}(y) - \cos(aDy) | \leq \epsilon \end{aligned} \quad (3-51)$$

证毕。

### 3.3.2 正弦函数的逼近

由 3.3.1 节获得的结果通过  $\sin(ax) = \cos(x - \pi/2)$  可扩展到对  $x \mapsto \sin(ax)$  的近似。下面构建网络对  $\cos(ax - b)$  的近似即完成对正弦函数的逼近。

**【推论 3.1】** 存在常数  $C > 0$ , 对于任意的  $a, S \in \mathbb{R}_+, b \in \mathbb{R}, \epsilon \in (0, \frac{1}{2})$ , 存在网络

$$\{\Psi_{a,b,S,\epsilon} \in \xi_{(1,1)} \mid \mathcal{D}(\Psi_{a,b,S,\epsilon}) \leq C((\log(\epsilon^{-1}))^2 + \log(\lceil aS \rceil + |b|)), \\ \mathcal{W}(\Phi_{a,b,S,\epsilon}) \leq 9, \quad \mathcal{A}(\Psi_{a,b,S,\epsilon}) \leq 1\}$$

满足

$$\|\Psi_{a,b,S,\epsilon}(x) - \cos(ax - b)\|_{L^\infty([-S,S])} \leq \epsilon \quad (3-52)$$

**证明:** 对于给定的  $a, S \in \mathbb{R}_+, \epsilon \in (0, \frac{1}{2})$ , 与定理 3.2 的证明中所定义的  $\Psi_{a,S,\epsilon}$  网络

同理, 考虑网络  $\Psi_{a,b,S,\epsilon}(x) := \Psi_{a,S+\frac{|b|}{a},\epsilon}(x - \frac{b}{a})$ , 并由式(3-51)可得

$$\sup_{x \in [-S,S]} |\Psi_{a,b,S,\epsilon}(x) - \cos(ax - b)| \leq \sup_{y \in [-(S+\frac{|b|}{a}), S+\frac{|b|}{a}]} |\Psi_{a,S+\frac{|b|}{a},\epsilon}(y) - \cos(ay)| \leq \epsilon \quad (3-53)$$

本章中的结果均具有以  $\epsilon^{-1}$  多对数缩放的有限宽度和深度的近似网络。由

$$\mathcal{M}(\Phi) \leq \mathcal{D}(\Phi) \mathcal{W}(\Phi) (\mathcal{W}(\Phi) + 1) \quad (3-54)$$

可知, 连通性的缩放不会比以  $\epsilon^{-1}$  多对数更快。因此, 近似误差  $\epsilon$  在连通性上(至少)以指数速度衰减, 而连通性与神经网络使用的参数数量等价。因此, 可以说网络提供了指数近似精度。

## 3.4 神经网络的万能逼近性质和深度的必要性

前面探讨了深度 ReLU 网络对广泛的函数类的逼近, 展示了深度网络良好的逼近性能。其实, 早在 1989 年, 研究者就严格证明了具有隐藏层的(Feed forward Neural Network, FNN)的万能近似性质, 即一个包含足够数量的隐藏层的 FNN, 至少包含一层具有“挤压”性质的激活函数(比如 sigmoid 函数), 那么它可以以任意精度完成从任意一个有限维空间到另一个有限维空间的波莱尔(Borel)可测函数的近似。波莱尔可测函数亦称波莱尔函数, 是一类非常广泛的函数, 包括一切阶梯函数、连续函数和分段函数。就本章涉及的内容而言, 只需要知道一切连续函数都是波莱尔可测的。

神经网络的万能近似定理表明, 多层前馈网络(Multilayer Feedforward Network, MLP)是一类通用逼近器, 它可以以任意精度近似任何函数。但是, 该定理并没有具体给出网络究竟需要多少隐藏层, 每个隐藏层又需要配备多少神经元。Ian Goodfellow 等在《深度学习》中指出, 尽管一个大的前馈网络能表示任何函数, 提供了表示函数的万能系统, 但是不存在一个万能的学习过程能保证一定学得这个函数。通常学习失败可能因为以下两个原因。

- (1) 使用的优化算法未能找到用于期望函数的参数值, 即陷入局部最优或者欠拟合。
- (2) 由于过拟合, 训练算法选择了错误的函数。

Barron 研究了近似误差和网络中节点数量的关系,提供了单层神经网络近似多种函数类的一些界,并表明具有一层 Sigmoid 非线性函数的前馈网络能够获得  $O(1/n)$  阶的积分平方误差,其中  $n$  为神经元数量。但在最坏的情况下可能需要指数级数量的隐藏层节点数。一个明显的例子是二进制情况,向量  $v \in \{0,1\}^n$  可能的二值型函数数量为  $2^{2^n}$ ,通常需要  $2^n$  次选择这样一个函数,且需要的自由度为  $O(2^n)$ 。总结来说,虽然单层前馈网络能够表示任何函数,但可能引起维度灾难而给计算带来极大的挑战,甚至不可计算,尤其对于高维数据。事实上,在众多情况下,更深的网络模型的使用可以减少表示期望函数的神经元数量,且能够更好地学习和泛化。

万能逼近性质已被证明适用于众多激活函数类型。近些年,由于 ReLU 激活函数的优越性,其被广泛的使用,函数近似领域也不例外。多位学者将万能近似理论扩展到了有限宽度的 ReLU 网络,并指出这种网络的深度随着数据的维度呈指数级增长。其中一项研究表明,ReLU 神经网络可以均匀逼近索伯列夫(Sobolev)空间中的函数,在索伯列夫空间中,网络规模随数据维数呈指数增长,并匹配下界。2019 年发表的基于深度卷积神经网络(Convolutional Neural Networks, CNN)的万能逼近理论表明网络的深度与数据维度相关,并呈指数级伸缩。广泛的应用表明更深的网络模型具有更好的泛化性能。

### 3.5 本章小结

作为由大量处理单元互联组成的非线性、自适应信息处理系统,神经网络能够通过其自组织、自学习能力计算出复杂输入与输出结果之间的关系,因此神经网络具有强大的函数逼近能力。对于众多的深度网络模型,通过合理地选择网络的拓扑结构和激活函数,能够实现任意高维非线性复杂函数的逼近。本章考虑以逼近乘法、多项式、光滑函数和正余弦函数等多种不同的函数显式构造深度神经网络,深度神经网络对于这些函数的逼近都具有指数精度,即具有在网络连通性中指数衰减的近似误差。此外,对比于浅层网络,深度网络具有更好的学习和泛化性能。

### 附录

以下 3 个引理与采用权重上限为 1 的神经网络实现任意权重的仿射变换有关。

**【引理 3.8】** 设  $d \in \mathbb{N}, a \in \mathbb{R}$ , 则存在网络  $\Phi_a \in \xi_{(d,d)}$  满足  $\Phi_a(x) = ax$ , 且  $\mathcal{D}(\Phi_a) \leq \lfloor \log(|a|) \rfloor + 4, \mathcal{W}(\Phi_a) \leq 3d, \mathcal{A}(\Phi_a) \leq 1$ 。

**证明:** 首先,对于  $|a| \leq 1$  的情况,结论显而易见,通过将  $\Phi_a$  看作仿射变换  $x \mapsto ax$ , 并且根据定义 3.1 将其表示为深度为 1 的神经网络。接下来,考虑  $|a| > 1$  的情况,对于  $d = 1$ , 令  $K := \lfloor \log(a) \rfloor, \alpha := a2^{-(K+1)}$ , 定义

$$w_1 := (1, -1)^T \in \mathbb{R}^{2 \times 1}$$

$$w_2 := \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{3 \times 2}$$

$$\mathbf{w}_k := \begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{3 \times 3}, \quad k \in \{3, 4, \dots, K+3\}$$

且  $\mathbf{w}_{K+4} := (\alpha, 0, -\alpha)$ 。注意, 对于  $k \in \{3, 4, \dots, K+3\}$ , 有

$$(\sigma \circ \mathbf{w}_2 \circ \sigma \circ \mathbf{w}_1)(x) = (\sigma(x), \sigma(x) + \sigma(-x))$$

且

$$\sigma(\mathbf{w}_k(x, x+y, y))^T = 2(x, x+y, y)$$

因此, 网络  $\Psi_a := \mathbf{w}_{K+4} \circ \sigma \circ \dots \circ \sigma \circ \mathbf{w}_1$  满足

$$\Psi_a(x) = ax, \quad \mathcal{D}(\Psi_a) = \lfloor \log(a) \rfloor + 4, \quad \mathcal{W}(\Psi_a) = 3, \mathcal{A}(\Psi_a) \leq 1$$

应用引理 3.3 得到  $\Psi_a$  的  $d$  个副本的并行化完成证明。

**【推论 3.2】** 令  $d, d' \in \mathbb{N}, a \in \mathbb{R}_+, \mathbf{w} \in [-a, a]^{d' \times d}$ , 且  $\mathbf{b} \in [-a, a]^{d'}$ , 则存在网络  $\Phi_{\mathbf{w}, \mathbf{b}} \in \xi_{(d, d')}$  满足  $\Phi_{\mathbf{w}, \mathbf{b}}(x) = \mathbf{w}x + \mathbf{b}$ , 且

$$\mathcal{D}(\Phi_{\mathbf{w}, \mathbf{b}}) \leq \lfloor \log(|a|) \rfloor + 5, \quad \mathcal{W}(\Phi_{\mathbf{w}, \mathbf{b}}) \leq \max\{d, 3d'\}, \mathcal{A}(\Phi_{\mathbf{w}, \mathbf{b}}) \leq 1$$

证明: 令  $\Phi_a \in \xi_{d', d'}$  是引理 3.8 中的乘法网络, 考虑  $F(x) := a^{-1}(\mathbf{w}x + \mathbf{b})$  为 1 层网络, 根据引理 3.1 可得,  $\Phi_{\mathbf{w}, \mathbf{b}} := \Phi_a \circ F$ 。

**【命题 3.4】** 令  $d, d' \in \mathbb{N}$  且  $\Phi \in \xi_{(d, d')}$ , 对于任意的  $x \in \mathbb{R}^d$ , 存在网络  $\Psi \in \xi_{(d, d')}$  满足  $\Psi(x) = \Phi(x)$ , 且有

$$\mathcal{D}(\Psi) \leq (\lfloor \log(\mathcal{A}(\Phi)) \rfloor + 5) \mathcal{D}(\Phi), \mathcal{W}(\Psi) \leq \max\{3d', \mathcal{W}(\Phi)\}, \mathcal{A}(\Psi) \leq 1$$

证明: 令

$$\Phi = F_{\mathcal{D}(\Phi)} \circ \sigma \circ \dots \circ \sigma \circ F_1$$

$$F_l := (\mathcal{A}(\Phi))^{-1} F_l \leq 1, \quad l \in \{1, 2, \dots, \mathcal{D}(\Phi)\}$$

且  $a := \mathcal{A}(\Phi)^{\mathcal{D}(\Phi)}$ 。令  $\Phi_a \in \xi_{(d', d')}$  是引理 3.8 中的乘法网络, 且定义

$$\Phi := F_{\mathcal{D}(\Phi)} \circ \sigma \circ \dots \circ \sigma \circ F_1$$

根据引理 3.1 有  $\Psi := \Phi_a \circ \Phi$ 。注意  $\Phi$  有上界 1 的权重以及与  $\Phi$  相同的深度和宽度。考虑到  $\sigma$  是正齐次的, 也就是对于任意的  $\lambda \geq 0$ , 有  $\sigma(\lambda x) = \lambda \sigma(x), x \in \mathbb{R}$ , 可得,  $\Psi(x) = \Phi(x), x \in \mathbb{R}^d$ 。应用引理 3.1 和引理 3.8 完成证明。

**【引理 3.9】** 令  $\varepsilon \in (0, \frac{1}{2}), n \in \mathbb{N}, a_0 < a_1 < \dots < a_n \in \mathbb{R}, f \in L^\infty([a_0, a_n])$ , 且

$$A := \left\lceil \max \left\{ |a_0|, |a_n|, 2 \max_{i \in \{2, 3, \dots, n-1\}} \frac{1}{|a_i - a_{i-1}|} \right\} \right\rceil, \quad B := \max\{1, \|f\|_{L^\infty([a_0, a_n])}\}$$

假设对于任意的  $i \in \{1, 2, \dots, n-1\}$ , 存在网络  $\Phi_i \in \xi_{(1, 1)}$ , 有  $\|f - \Phi_i\|_{L^\infty([a_i, a_{i+1}])} \leq \varepsilon/3$ 。那么, 存在网络  $\Phi \in \xi_{(1, 1)}$ , 满足

$$\|f - \Phi\|_{L^\infty([a_0, a_n])} \leq \varepsilon$$

且

$$\mathcal{D}(\Phi) \leq \left( \sum_{i=1}^{n-1} \mathcal{D}(\Phi_i) \right) + Cn(\log(\varepsilon^{-1}) + \log(B) + \log(A))$$

$$\mathcal{W}(\Phi) \leq 7 + \max\{2, \max_{i \in \{1, 2, \dots, n-1\}} \mathcal{W}(\Phi_i)\}, \mathcal{A}(\Phi) = \max\{1, \max_i \mathcal{A}(\Phi_i)\}$$

其中,  $C > 0$  是一个绝对常数, 也就是独立于  $\varepsilon, n, f, a_0, a_1, \dots, a_n$ 。

**证明:** 首先根据如下的定义形成统一划分的神经网络  $(\Psi_{i=1})_{i=1}^{n-1} \in \xi_{(1,1)}$ , 即

$$\Psi_1(x) := 1 - \frac{1}{a_2 - a_1} \sigma(x - a_1) + \frac{1}{a_2 - a_1} \sigma(x - a_2)$$

$$\Psi_i(x) := \frac{1}{a_i - a_{i-1}} \sigma(x - a_{i-1}) - \left( \frac{1}{a_i - a_{i-1}} + \frac{1}{a_{i+1} - a_i} \right) \sigma(x - a_i) + \frac{1}{a_{i+1} - a_i} \sigma(x - a_{i+1}), \quad i \in \{2, 3, \dots, n-2\}$$

$$\Psi_{n-1}(x) := \frac{1}{a_{n-1} - a_{n-2}} \sigma(x - a_{n-2}) - \frac{1}{a_{n-1} - a_{n-2}} \sigma(x - a_{n-1})$$

注意  $\text{supp}(\Psi_1) = (\infty, a_2)$ ,  $\text{supp}(\Psi_{n-1}) = [a_{n-2}, \infty)$  和  $\text{supp}(\Psi_i) = [a_{i-1}, a_{i+1}]$ 。确保, 对于任意的  $i \in \{1, 2, \dots, n-1\}$ ,  $\Psi_i$  能够通过神经网络实现且其满足

$$\mathcal{D}(\Psi_i) \leq 2(\lceil \log(\mathcal{A}(w)) \rceil + 5), \mathcal{W}(\Psi_i) \leq 3, \mathcal{A}(\Psi_i) \leq 1$$

接下来, 令  $\Phi_{B+1/6, \epsilon/3} \in \xi_{(2,1)}$  为命题 3.2 中的乘法网络, 且定义该网络为

$$\Phi_i(x) := \Phi_{B+1/6, \epsilon/3}(\Phi_i(x), \Psi_i(x))$$

根据引理 3.3 和引理 3.1, 且以和的形式有

$$\Phi(x) := \sum_{i=1}^{n-1} \Phi_i(x)$$

由引理 3.8 和命题 3.2 可确保, 对于任意的  $i \in \{1, 2, \dots, n-1\}$ ,  $x \in [a_{i-1}, a_{i+1}]$ , 有

$$\begin{aligned} & |f(x)\Psi_i(x) - \Phi_i(x)| \\ & \leq |f(x)\Psi_i(x) - \Phi_i(x)\Psi_i(x)| + |\Phi_i(x)\Psi_i(x) - \Phi_{B+1/6, \epsilon/3}(\Phi_i(x), \Psi_i(x))| \\ & \leq (\Psi_i(x) + 1) \frac{\epsilon}{3} \end{aligned}$$

且  $\text{supp}(\Phi_i) = [a_{i-1}, a_{i+1}]$ 。特别是对于任意的  $x \in [a_0, a_n]$ , 活动索引集

$$I(x) := \{i \in \{1, 2, \dots, n-1\} : \Phi_i(x) \neq 0\}$$

最多包含两个元素。此外, 由  $\sum_{i \in I(x)} \Psi_i(x) = 1$  可知, 对于任意的  $x \in \mathbb{R}$ , 有

$$|f(x) - \Phi(x)| = \left| \sum_{i \in I(x)} \Psi_i(x)f(x) - \sum_{i \in I(x)} \Phi_i(x) \right| \leq \sum_{i \in I(x)} (\Psi_i(x) + 1) \frac{\epsilon}{3} \leq \epsilon$$

由引理 3.1、引理 3.3、命题 3.2 和引理 3.9, 可得出结论  $\Phi$  满足声明的特性。接下来, 将引理 3.6 推广到任意(有限)区间。

**【引理 3.10】** 对于  $a, b \in \mathbb{R}$  且  $a < b$ , 令

$$V_{[a,b]} := \{f \in C^\infty([a,b], \mathbb{R}) : \|f^{(n)}(x)\|_{L^\infty([a,b])} \leq n!, \forall n \in \mathbb{N}_0\}$$

存在一个常数  $C > 0$ , 对于任意的  $a, b \in \mathbb{R}$ ,  $a < b$ ,  $f \in S_{[a,b]}$ , 且  $\epsilon \in (0, \frac{1}{2})$ , 存在网络  $\Psi_{f, \epsilon} \in \xi_{1,1}$  满足

$$\|\Psi_{f, \epsilon} - f\|_{L^\infty([a,b])} \leq \epsilon$$

且有

$$\mathcal{D}(\Psi_{f, \epsilon}) \leq C \max\{2, (b-a)\} (\log(\epsilon^{-1}))^2 + \log(\lceil \max\{|a|, |b|\} \rceil) + \log\left(\left\lceil \frac{1}{b-a} \right\rceil\right)$$

$$\mathcal{W}(\Psi_{f, \epsilon}) \leq 16, \mathcal{A}(\Psi_{f, \epsilon}) \leq 1$$

**证明:** 考虑引理 3.6 讨论过的情况  $[a, b] = [-1, 1]$ , 首先证明在区间  $[-S, S]$ ,  $S \in (0,$

1)的情况,然后使用这个结果根据引理 3.8 通过一个修补参数建立更一般的情况。注意到对于  $g \in V_{[-S,S]}$ ,由于  $D < 1$ ,函数  $f_g: [-1,1] \rightarrow \mathbb{R}, x \mapsto g(Sx)$  在区间  $V_{[-1,1]}$  上。因此,根据引理 3.6,存在一个常数  $C > 0$ ,对于所有的  $g \in V_{[-S,S]}$  和  $\epsilon \in (0, 1/2)$ ,存在网络  $\Psi \in \xi_{(1,1)}$  满足  $\|\Psi_{g,\epsilon} - f_g\|_{L^\infty([-1,1])} \leq \epsilon$ ,且  $\mathcal{D}(\Psi_{g,\epsilon}) \leq C(\log(\epsilon^{-1}))^2, \mathcal{W}(\Psi_{g,\epsilon}) \leq 9, \mathcal{A}(\Psi_{g,\epsilon}) \leq 1$ 。然后通过使网络近似  $g$  为  $\Psi_{g,\epsilon} := \Psi_{g,\epsilon} \circ \Phi_{S^{-1}}$  来建立该声明,其中  $\Phi_{S^{-1}}$  是引理 3.9 中的标量乘法网络,即

$$\begin{aligned} \|\Psi_{g,\epsilon}(x) - g(x)\|_{L^\infty([-S,S])} &= \sup_{x \in [-S,S]} \left| \Psi_{g,\epsilon}\left(\frac{x}{S}\right) - f_g\left(\frac{x}{S}\right) \right| \\ &= \sup_{x \in [-1,1]} |\Psi_{g,\epsilon}(x) - f_g(x)| \leq \epsilon \end{aligned}$$

由引理 3.1 可得

$$\mathcal{D}(\Psi_{g,\epsilon}) \leq C \left( (\log(\epsilon^{-1}))^2 + \log\left(\left\lceil \frac{1}{S} \right\rceil\right) \right), \mathcal{W}(\Psi_{g,\epsilon}) \leq 9, \mathcal{A}(\Psi_{g,\epsilon}) \leq 1$$

接下来陈述在一般区间  $[a,b]$  上的证明。通过在长度不超过 2 的间隔上逼近  $f$  并结合根据引理 3.10 得到的逼近一起实现该证明。首先对于  $b-a \leq 2$  的情况,将函数移动  $(a+b)/2$  以使其域围绕原点居中,然后使用上面的结果完成区间  $[-S,S], S \in (0,1)$  上的近似,如果  $b-a=2$ ,两者结合推论 3.2 通过权重以 1 为界的神经网络实现移位。使用引理 3.1 实现该移位的网络构建从而实现  $g$ ,因此可得,存在常数  $C'$ ,对于任意的  $[a,b] \subseteq \mathbb{R}$ ,且  $b-a \leq 2, g \in V_{[a,b]}, \epsilon \in (0, 1/2)$ ,存在网络满足  $\|g - \Psi_{g,\epsilon}\|_{L^\infty([a,b])} \leq \epsilon$ ,且  $\mathcal{D}(\Psi_{g,\epsilon}) \leq C' \left( (\log(\epsilon^{-1}))^2 + \log\left(\left\lceil \frac{1}{b-a} \right\rceil\right) \right), \mathcal{W}(\Psi_{g,\epsilon}) \leq 9, \mathcal{A}(\Psi_{g,\epsilon}) \leq 1$ 。最后,对于  $b-a > 2$ ,划分区间  $[a,b]$ ,并且应用引理 3.9 如下,令  $n := \lceil b-a \rceil$ ,且定义

$$a_i := a + i \frac{b-a}{n}, \quad i \in \{0, 1, \dots, n\}$$

接着,对于  $i \in \{0, 1, \dots, n-1\}$ ,令  $g_i: [a_{i-1}, a_{i+1}] \rightarrow \mathbb{R}$  将  $g$  限制在区间  $[a_{i-1}, a_{i+1}]$  中,且有  $a_{i+1} - a_{i-1} = \frac{2(b-a)}{n} \in \left(\frac{4}{3}, 2\right]$ 。进一步,对于  $i \in \{0, 1, \dots, n-1\}$ ,类似于上述构建,令  $\Psi_{g_i, \epsilon/3}$  是错误为  $\epsilon/3$  的逼近  $g_i$  的网络。那么,对于  $i \in \{0, 1, \dots, n-1\}$ ,有  $\|g - \Psi_{g_i, \epsilon/3}\|_{L^\infty([a_{i-1}, a_{i+1}])} \leq \frac{\epsilon}{3}$ ,并应用引理 3.9 产生期望的结果。

## 参考文献

本章参考文献扫描下方二维码。

