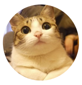
CS231n课程笔记翻译：神经网络笔记1（上）



杜客
求索

译者注：本文智能单元首发，译自斯坦福CS231n课程笔记Neural Nets notes 1，课程教师Andrej Karpathy授权翻译。本篇教程由杜客翻译完成，巩子嘉和堃堃进行校对修改。译文含公式和代码，建议PC端阅读。

原文如下

内容列表：

快速简介

在不诉诸大脑的类比的情况下，依然是可以对神经网络算法进行介绍的。在线性分类一节中，在给出图像的情况下，是使用 $s=Wx$ 来计算不同视觉类别的评分，其中 W 是一个矩阵， x 是一个输入列向量，它包含了图像的全部像素数据。在使用数据库CIFAR-10的案例中， x 是一个[3072x1]的列向量， W 是一个[10x3072]的矩阵，所以输出的评分是一个包含10个分类评分的向量。

神经网络算法则不同，它的计算公式是 $s=W_2max(0,W_1x)$。其中 W_1 的含义是这样的：举个例子来说，它可以是一个[100x3072]的矩阵，其作用是将图像转化为一个100维的过渡向量。函数 $max(0,-)$ 是非线性的，它会作用到每个元素。这个非线性函数有多种选择，后续将会学到。但这个形式是一个最常用的选择，它就是简单地设置阈值，将所有小于0的值变成0。最终，

矩阵 W_2 的尺寸是[10x100]，因此将得到10个数字，这10个数字可以解释为是分类的评分。注意非线性函数在计算上是至关重要的，如果略去这一步，那么两个矩阵将会合二为一，对于分类的评分计算将重新变成关于输入的线性函数。这个非线性函数就是*改变*的关键点。参数 W_1, W_2 将通过随机梯度下降来学习到，他们的梯度在反向传播过程中，通过链式法则来求导计算得出。

一个三层的神经网络可以类比地看做 $s = W_3 max(0, W_2 max(0, W_1 x))$，其中 W_1, W_2, W_3 是需要进行学习的参数。中间隐层的尺寸是网络的超参数，后续将学习如何设置它们。现在让我们先从神经元或者网络的角度理解上述计算。

单个神经元建模

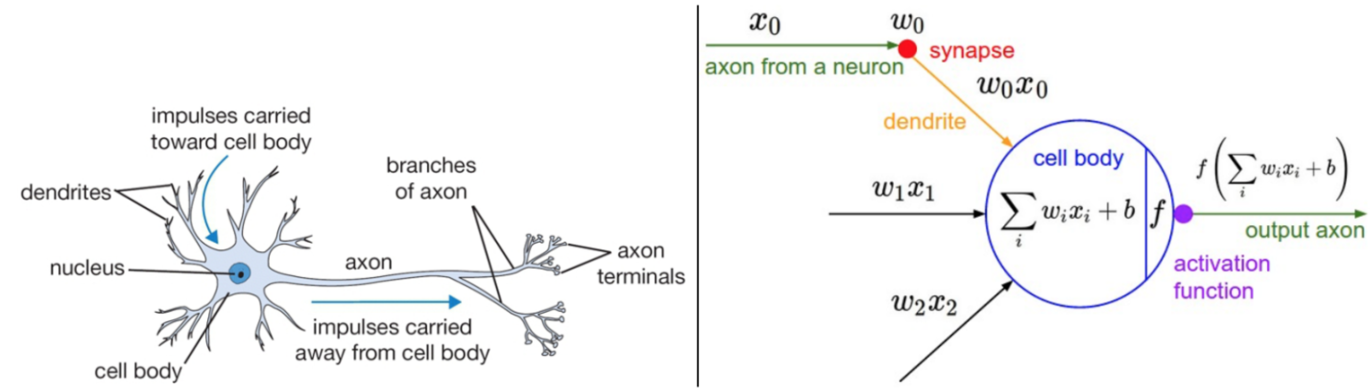
神经网络算法领域最初是被对生物神经系统建模这一目标启发，但随后与其分道扬镳，成为一个工程问题，并在机器学习领域取得良好效果。然而，讨论将还是从对生物系统的一个高层次的简略描述开始，因为神经网络毕竟是从这里得到了启发。

生物动机与连接

大脑的基本计算单位是**神经元（neuron）**。人类的神经系统中大约有860亿个神经元，它们被大约10^14-10^15个**突触（synapses）**连接起来。下面图表的左边展示了一个生物学的神经元，右边展示了一个常用的数学模型。每个神经元都从它的**树突**获得输入信号，然后沿着它唯一的**轴突（axon）**产生输出信号。轴突在末端会逐渐分枝，通过突触和其他神经元的树突相连。

在神经元的计算模型中，沿着轴突传播的信号（比如 x_0 ）将基于突触的突触强度（比如 w_0 ），与其他神经元的树突进行乘法交互（比如 $w_0 x_0$ ）。其观点是，突触的强度（也就是权重 w ），是可学习的且可以控制一个神经元对于另一个神经元的影响强度（还可以控制影响方向：使其兴奋（正权重）或使其抑制（负权重））。在基本模型中，树突将信号传递到细胞体，信号在细胞体中相加。如果最终之和高于某个阈值，那么神经元将会*激活*，向其轴突输出一个峰值信号。在计算模型中，我们假设峰值信号的准确时间点不重要，是激活信号的频率在交流信息。基于这个*速率编码*的观点，将神经元的激活率建模为**激活函数（activation function）** f，它表达了轴突上激活信号的频率。由于历史原因，激活函数常常选择使用**sigmoid函数** σ，该函数输入实数值（求和后的信号强度），然后将输入值压缩到0-1之间。在本节后面部分会看到这些激活函数的各种细节。

—



左边是生物神经元，右边是数学模型。

—

一个神经元前向传播的实例代码如下：

```
class Neuron(object):
  # ...
  def forward(inputs):
    """ 假设输入和权重是1-D的numpy数组，偏差是一个数字 """
    cell_body_sum = np.sum(inputs * self.weights) + self.bias
    firing_rate = 1.0 / (1.0 + math.exp(-cell_body_sum)) # sigmoid激活函数
    return firing_rate
```

换句话说，每个神经元都对它的输入和权重进行点积，然后加上偏差，最后使用非线性函数（或称为激活函数）。本例中使用的是sigmoid函数 $\sigma(x)=1/(1+e^{-x})$。在本节的末尾部分将介绍不同激活函数的细节。

粗糙模型：要注意这个对于生物神经元的建模是非常粗糙的：在实际中，有很多不同类型的神经元，每种都有不同的属性。生物神经元的树突可以进行复杂的非线性计算。突触并不就是一个简单的权重，它们是复杂的非线性动态系统。很多系统中，输出的峰值信号的精确时间点非常重要，说明速率编码的近似是不够全面的。鉴于所有这些已经介绍和更多未介绍的简化，如果你画出人类大脑和神经网络之间的类比，有神经科学背景的人对你的板书起哄也是非常自然的。如果你对此感兴趣，可以看看这份评论或者最新的另一份。

作为线性分类器的单个神经元

神经元模型的前向计算数学公式看起来可能比较眼熟。就像在线性分类器中看到的那样，神经元有能力“喜欢”（激活函数值接近1），或者不喜欢（激活函数值接近0）输入空间中的某些线性区域。因此，只要在神经元的输出端有一个合适的损失函数，就能让单个神经元变成一个线性分类器。

二分类Softmax分类器。举例来说，可以把$\sigma(\Sigma_i w_i x_i + b)$看做其中一个分类的概率$P(y_i = 1|x_i; w)$，其他分类的概率为$P(y_i = 0|x_i; w) = 1 - P(y_i = 1|x_i; w)$，因为它们加起来必须为1。根据这种理解，可以得到交叉熵损失，这个在线性分一节中已经介绍。然后将它最优化为二分类的Softmax分类器（也就是逻辑回归）。因为sigmoid函数输出限定在0-1之间，所以分类器做出预测的基准是神经元的输出是否大于0.5。

二分类SVM分类器。或者可以在神经元的输出外增加一个最大边界折叶损失（max-margin hinge loss）函数，将其训练成一个二分类的支持向量机。

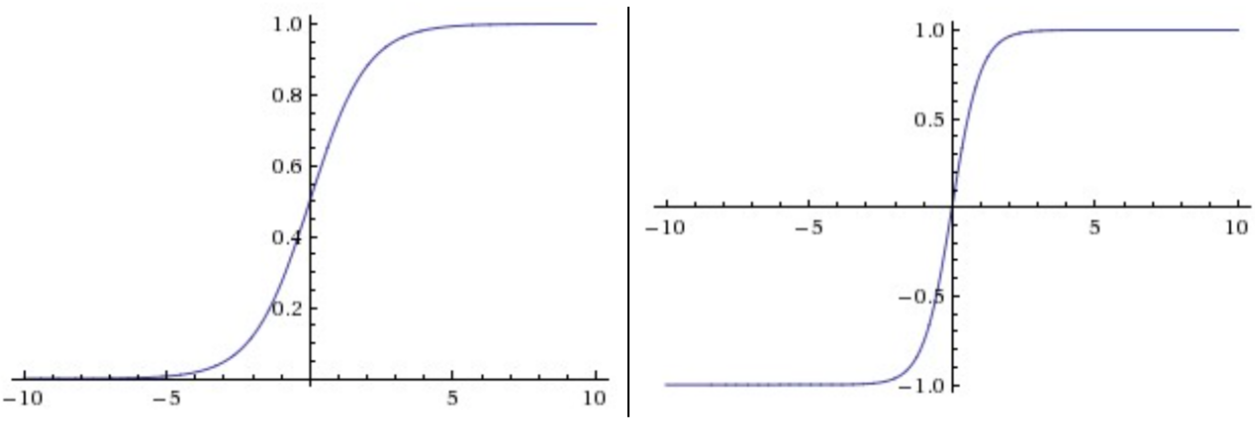
理解正则化。在SVM/Softmax的例子中，正则化损失从生物学角度可以看做*逐渐遗忘*，因为它的效果是让所有突触权重w在参数更新过程中逐渐向着0变化。

> 一个单独的神经元可以用来实现一个二分类分类器，比如二分类的Softmax或者SVM分类器。

常用激活函数

每个激活函数（或非线性函数）的输入都是一个数字，然后对其进行某种固定的数学操作。下面是在实践中可能遇到的几种激活函数：

—



左边是Sigmoid非线性函数，将实数压缩到[0,1]之间。右边是tanh函数，将实数压缩到[-1,1]。

—

Sigmoid。sigmoid非线性函数的数学公式是$\sigma(x) = 1/(1 + e^{-x})$，函数图像如上图的左边所示。在前一节中已经提到过，它输入实数值并将其“挤压”到0到1范围内。更具体地说，很大的负数变成0，很大的正数变成1。在历史上，sigmoid函数非常常用，这是因为它对于神经元的激活频率有良好的解释：从完全不激活（0）到在求和后的最大频率处的完全饱和（**saturated**）的

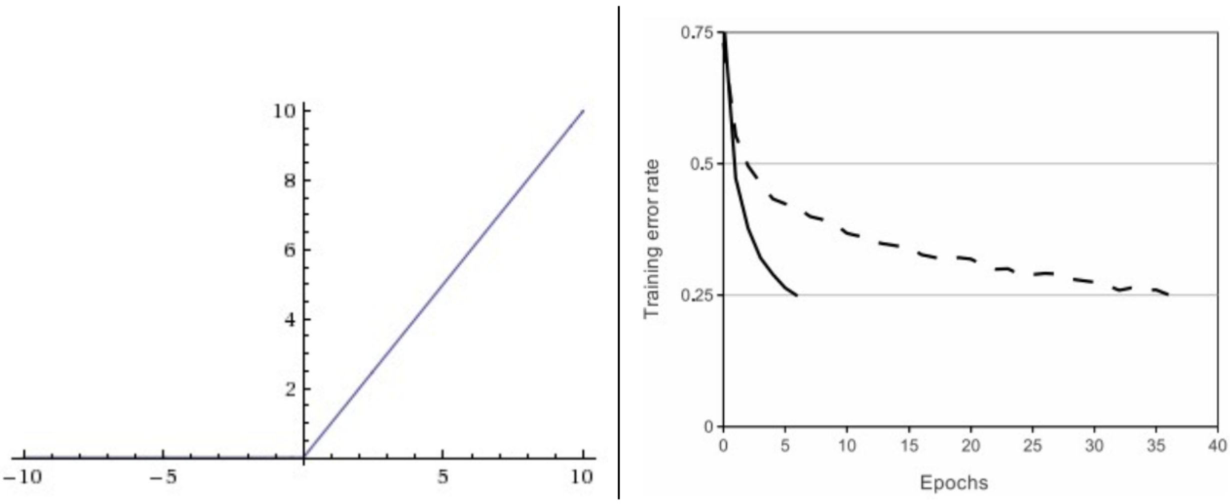
激活（1）。然而现在sigmoid函数已经不太受欢迎，实际很少使用了，这是因为它有两个主要缺点：

Sigmoid函数饱和使梯度消失。sigmoid神经元有一个不好的特性，就是当神经元的激活在接近0或1处时会饱和：在这些区域，梯度几乎为0。回忆一下，在反向传播的时候，这个（局部）梯度将会与整个损失函数关于该门单元输出的梯度相乘。因此，如果局部梯度非常小，那么相乘的结果也会接近零，这会有效地“杀死”梯度，几乎就有没有信号通过神经元传到权重再到数据了。还有，为了防止饱和，必须对于权重矩阵初始化特别留意。比如，如果初始化权重过大，那么大多数神经元将会饱和，导致网络就几乎不学习了。

Sigmoid函数的输出不是零中心的。这个性质并不是我们想要的，因为在神经网络后面层中的神经元得到的数据将不是零中心的。这一情况将影响梯度下降的运作，因为如果输入神经元的数据总是正数（比如在$f=w^Tx+b$中每个元素都$x>0$），那么关于w的梯度在反向传播的过程中，将会要么全部是正数，要么全部是负数（具体依整个表达式f而定）。这将会导致梯度下降权重更新时出现z字型的下降。然而，可以看到整个批量的数据的梯度被加起来后，对于权重的最终更新将会有不同的正负，这样就从一定程度上减轻了这个问题。因此，该问题相对于上面的神经元饱和问题来说只是个小麻烦，没有那么严重。

Tanh。tanh非线性函数图像如上图右边所示。它将实数值压缩到[-1,1]之间。和sigmoid神经元一样，它也存在饱和问题，但是和sigmoid神经元不同的是，它的输出是零中心的。因此，在实际操作中，*tanh非线性函数比sigmoid非线性函数更受欢迎*。注意tanh神经元是一个简单放大的sigmoid神经元，具体说来就是：$tanh(x)=2\sigma(2x)-1$。

—



左边是ReLU（校正线性单元：Rectified Linear Unit）激活函数，当$x=0$时函数值为0。当$x>0$函数的斜率为1。右边是从 Krizhevsky等的论文中截取的图表，指明使用ReLU比使用tanh的收敛快6倍。

—

ReLU。在近些年ReLU变得非常流行。它的函数公式是$f(x)=max(0,x)$。换句话说，这个激活函数就是一个关于0的阈值（如上图左侧）。使用ReLU有以下一些优缺点：

优点：相较于sigmoid和tanh函数，ReLU对于随机梯度下降的收敛有巨大的加速作用（Krizhevsky 等的论文指出有6倍之多）。据称这是由它的线性，非饱和的公式导致的。
优点：sigmoid和tanh神经元含有指数运算等耗费计算资源的操作，而ReLU可以简单地通过对一个矩阵进行阈值计算得到。
缺点：在训练的时候，ReLU单元比较脆弱并且可能“死掉”。举例来说，当一个很大的梯度流过ReLU的神经元的时候，可能会导致梯度更新到一种特别的状态，在这种状态下神经元将无法被其他任何数据点再次激活。如果这种情况发生，那么从此所以流过这个神经元的梯度将都变成0。也就是说，这个ReLU单元在训练中将不可逆转的死亡，因为这导致了数据多样化的丢失。例如，如果学习率设置得太高，可能会发现网络中40%的神经元都会死掉（在整个训练集中这些神经元都不会被激活）。通过合理设置学习率，这种情况的发生概率会降低。

Leaky ReLU。Leaky ReLU是为解决“ReLU死亡”问题的尝试。ReLU中当x<0时，函数值为0。而Leaky ReLU则是给出一个很小的负数梯度值，比如0.01。所以其函数公式为$f(x)=1(x<0)(\alpha x)+1(x>=0)(x)$其中$\alpha$是一个小的常量。有些研究者的论文指出这个激活函数表现很不错，但是其效果并不是很稳定。Kaiming He等人在2015年发布的论文Delving Deep into Rectifiers中介绍了一种新方法PReLU，把负区间上的斜率当做每个神经元中的一个参数。然而该激活函数在在不同任务中均有益处的一致性并没有特别清晰。

Maxout。一些其他类型的单元被提了出来，它们对于权重和数据的内积结果不再使用$f(w^Tx+b)$函数形式。一个相关的流行选择是Maxout（最近由Goodfellow等发布）神经元。Maxout是对ReLU和leaky ReLU的一般化归纳，它的函数是：$max(w_1^Tx+b_1,w_2^Tx+b_2)$。ReLU和Leaky ReLU都是这个公式的特殊情况（比如ReLU就是当$w_1,b_1=0$的时候）。这样Maxout神经元就拥有ReLU单元的所有优点（线性操作和不饱和），而没有它的缺点（死亡的ReLU单元）。然而和ReLU对比，它每个神经元的参数数量增加了一倍，这就导致整体参数的数量激增。

以上就是一些常用的神经元及其激活函数。最后需要注意一点：在同一个网络中混合使用不同类型的神经元是非常少见的，虽然没有什么根本性问题来禁止这样做。

一句话：“*那么该用那种呢？*”用ReLU非线性函数。注意设置好学习率，或许可以监控你的网络中死亡的神经元占的比例。如果单元死亡问题困扰你，就试试Leaky ReLU或者Maxout，不要再用sigmoid了。也可以试试tanh，但是其效果应该不如ReLU或者Maxout。