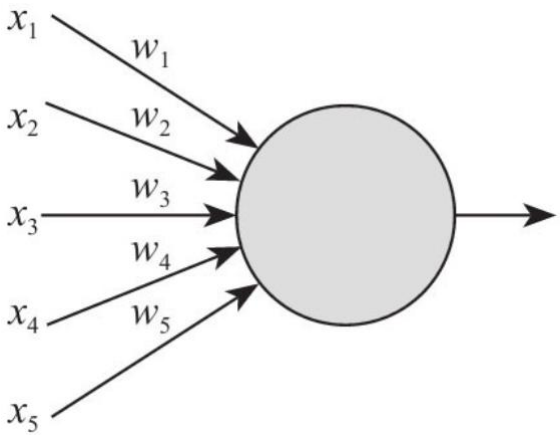
神经元网络

王裕 2019/05/19

神经元与激励函数

神经元

神经元是神经网络的基本组成，如果把它画出来，大概就长成下面这样：

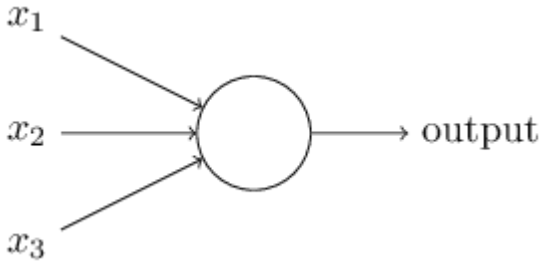


图中神经元左边的 x 表示对神经元的多个输入，w 表示每个输入对应的权重，神经元右边的箭头表示它仅有一个输出。

当然神经元也有很多种，下面介绍两种比较基础的。

神经元 1：感知器

神经网络技术起源于上世纪五、六十年代，当时叫感知机(perceptron)，其中的单个神经元我们可以叫作感知器。感知器的特点具有浓厚的时代气息：其输入输出都是二进制形式的(据说由于计算技术的落后，当时感知器传输函数是用线拉动变阻器改变电阻的方法机械实现的)。



如上图所示，感知器有多个二进制输入(值只能是 0 或 1)X1、X2...Xn，每个输入有对应的权值 W1、W2...Wn(图中没画出来)，将每个输入值乘以对应的权值再求和(ΣXjWj)，然后与一个阈值(threshold) 比较，大于阈值则输出 1、小于阈值则输出 0。 写成公式的话如下：

$$\text{output} = \begin{cases} 0 & \text{if } \sum_j w_j x_j \leq \text{threshold} \\ 1 & \text{if } \sum_j w_j x_j > \text{threshold} \end{cases}$$

如果把公式写成矩阵形式，再用 b 来表示负数的阈值(即 b=-threshold)，那就得到了如下公式：

$$output = f(x) = \begin{cases} 0 & \text{if } wx + b \leq 0 \\ 1 & \text{if } wx + b > 0 \end{cases}$$

举个例子

例如你所在的城市将有一个你的偶像的演唱会，你正决定是否观看，你可能会通过以下三个方面来权衡你的决定：

天气好吗？

你的好朋友是否愿意陪你去？

是否这个活动距离公共交通很近？（你自己没车）

我们将这三个因素用对应的二进制变量 x1，x2 和 x3 表示。比如，当天气还不错时，我们有 x1=1，天气不好时 x1=0；相似的，如果好基友愿意去，x2=1，否则 x2=0；对于公共交通 x3 同理赋值。

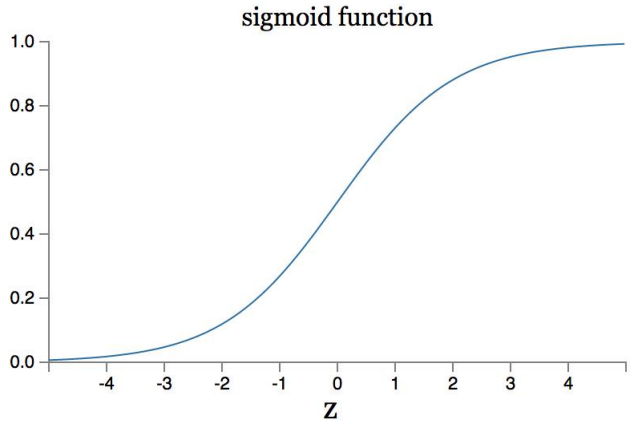
然后根据你的意愿，比如让天气权重 w1=6，其他条件权重分别为 w2=2，w3=2。权重 w1 值越大表示天气影响最大，比起好基友加入或者交通距离的影响都大。最后，假设你选择 5 做为感知器阈值（即 b 为-5），按照这种选择，这个感知器就能实现这个决策模型：当天气好时候输出 1，天气不好时候输出 0，无论你的好基友是否愿意去，或者交通是否比较近。

神经元 2：Sigmoid 神经元

先来认识一个函数：Sigmoid 函数，这个单词在某些工具上直译是“乙状结肠”、也还真有某些资料把 Sigmoid 神经元叫作乙状结肠神经元的。 其实它是一个常用的“S”型函数，可以把变量映射到(0,1)区间内，其公式如下：

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

它的函数图像是如下图如示的“S”型：



那么 Sigmoid 神经元是什么呢？与感知器有什么区别？

首先，在 Sigmoid 神经元中，输入的值不再是二进制，而是 0 到 1 之间的任意值。即 Xi 取值是 0 到 1 之间的任意实数。

其次，而 Sigmoid 神经元的输出也不再是 0 或 1，而是 σ(wx+b)。 注意"wx+b"是简写(矩阵)形式，请对照上面的感知器的公式。

因此我们可以得出 Sigmoid 神经元的公式：

$$output = f(x) = \frac{1}{1 + e^{-(wx + b)}}$$

可以发现当 z=w*x+b 是一个大的正数时，那么 σ (z)≈1，而当 z=w*x+b 是一个很小的负数(“绝对值很大的负数”比较好理解）时，σ (z)≈0。处于这两种情况时，Sigmoid 神经元的输出跟感知器是很接近的。只有当 w*x+b 在一个适度的值，Sigmoid 神经元和感知器偏差才较大。

激励函数

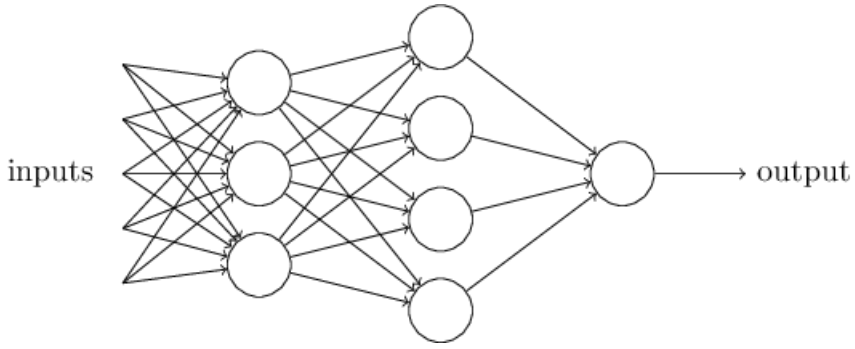
神经元的输入和输出之间具有函数关系，这个函数就称为激励函数。所以上面提到的 Sigmoid 函数就是激励函数的一种，感知器的那个函数也可以称为阈值(或阶跃)激励函数。

激励函数也叫点火规则，这使它与人脑的工作联系起来。当一个神经元的输入足够大时，就会点火，也就是从它的轴突（输出连接）发送电信号。同样，在人工神经网络中，只要输入超过一定标准时才会产生输出，这就是点火规则的思想。

神经网络的结构

神经网络简单地说就是将多个神经元连接起来、组成一个网络。本文介绍的是最简单、历史悠久的一种：“多层感知机”（但我们讲的这个它里面的神经元并不是感知器、而是 Sigmoid 神经元，名词混乱+1），或称之为“多层向前神经网络(Multilayer Feed-Forward Neural Network)”，它的特点是有多层（废话），且神经元之间是全连接的，即后一层的神经元会连接到前一层的每个神经元（这里定义下从输入层到输出层为从“后”向“前”）。

一个多层感知机的示意图如下，网络的最左边一层被称为输入层，其中的神经元被称为输入神经元。最右边及输出层包含输出神经元，在这个例子中，只有一个单一的输出神经元，但一般情况下输出层也会有多个神经元。中间层被称为隐含层，因为里面的神经元既不是输入也不是输出。



训练神经网络的意义

现在神经元有了，神经网络的结构也有了，现在回到核心的问题上来：我们拿神经网络干什么？ 要怎样使它做到？

训练的目标

按照常识、用人话来说，神经网络的作用就是我们预先给它大量的数据(包含输入和输出)来进行训练，训练完成后，我们希望它对于将来的真实环境的输入也能给出一个令我们满意的输出。

损失函数/代价函数（Loss 函数）

那么怎样用数学的方式来表示一个输出有多么令我们满意呢？ 这里我们引入损失函数(或称代价函数、Loss 函数)的概念。

现假设有 n 组包含了输入和真实结果（或称期望结果、期望输出）的样本数据，对于每组输入，我们的神经网络输出的结果记为 fi，真实结果(期望结果)记为 yi。

使用数学工具中的 MAE（Mean Absolute Error,平均绝对误差），可以非常直观地表达出输出结果和真实结果的偏差，因此我们可以用 MAE 来写出一个下面这样的 Loss 函数，Loss 值越大、说明神经网络的输出结果越远离我们的期望。

$$Loss = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}|f_i - y_i|$$

也可以用 MSE（Mean Squared Error，均方误差）作为损失函数，MSE 能更好地评价数据的变化程度，简单地说因为平方了一下、偏差是会被放大的。

$$Loss = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(f_i - y_i)^2$$

将 Sigmoid 神经元的表达式 f(x)= σ (wx+b)代入上面的损失函数中，可以发现 x（输入）是固定的，yi（期望结果）也是固定的，让我们感性地想象一下：实际上影响 Loss 的只有 w 和 b，而最重要的任务也就是寻找 w 和 b 使得 Loss 最小。

再具象一点，其实对神经网络进行训练的目的就是为每个神经元找到最适合它的 w 和 b 的值，从而使得整个神经网络的输出最接近我们的期望(说“最”其实有点违反广告法，神经网络最终达到的很难说是问题的最优解)。

注：下面将真正用到的损失函数

在实际中，为了方便求导，一般使用如下的 Loss 函数：

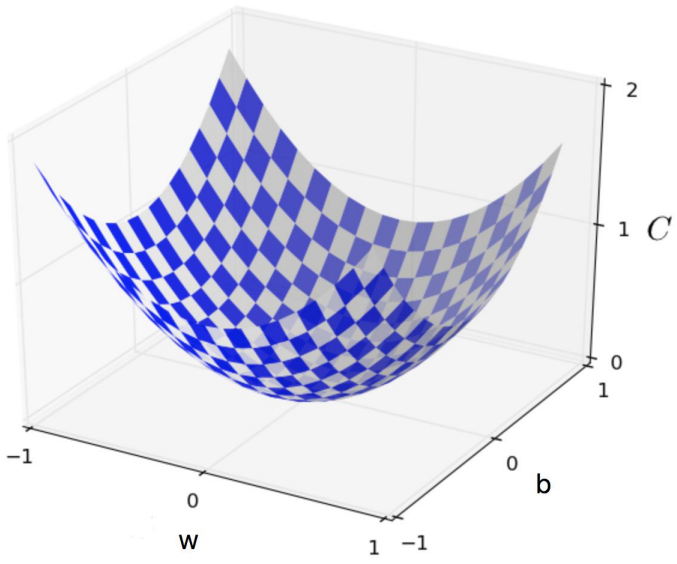
$$Loss = \frac{1}{2n}\sum_{i=1}^{n}(f_i - y_i)^2$$

梯度下降

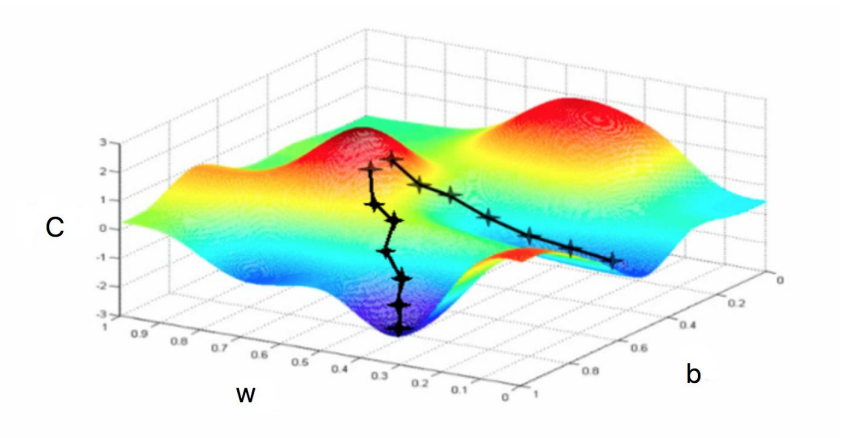
根据上面的结论，可以把损失(Loss)记作 C，而 C 又只与 w 和 b 有关，那么可以看成 C 是一个关于 w 和 b 的函数，如下图所示。注意由于神经网络中其实有大量的“w”和“b”(回忆一下、每个神经元都有多个权重和一个阈值)，因此这里也需要感性的认知。

$$C = f(w, b)$$

如果把图画出来，它可能是下面这样的：



我们的目标是找到 w 和 b 使 C 最小，当然上面这张图很容易看出来合适的 w 和 b 在哪，但当面对更复杂的情况时、比如下图这样的，应该如何快速地找到 C 最小的点呢？



这里我们引入梯度下降算法，原理很简单：把上图看作是一个丘陵地带，想象我们有一个球放在某个位置，让它“自然地向低处滚”，滚得越低，C 就越小，我们就越高兴。
那么怎样使得它往低处滚呢？（注意这里要搬出全文中第一个比较烧脑的概念了）微分法则告诉我们，当 w 移动 Δw、b 移动 Δb 时，有：

$$\Delta C \approx \frac{\partial C}{\partial w}\Delta w + \frac{\partial C}{\partial b}\Delta b$$

由于 C 表示的是损失，我们想让球往低处滚，当然是希望 C 不断变小，那 ΔC 应该恒为负，那么 Δw、Δb 应该如何取值呢？ 梯度下降法是这么设计的：

$$\Delta w = -\eta \frac{\partial C}{\partial w} \qquad \Delta b = -\eta \frac{\partial C}{\partial b}$$

可以看出如此取值可以使 ΔC 恒为负，其中的 η 称为学习率。
那么现在问题变成了 ∂C/∂w、∂C/∂b，即 C 对 w 和 C 对 b 的偏导，这两个鬼东西要怎么求？

反向传播

反向传播(back propagation)是在这种场景下快速求解 ∂C/∂w、∂C/∂b 的算法，用了这个算法的多层感知机--也就是这篇文章讲的神经网络--也就叫作 BP 神经网络(名词混乱+1)。
这一章包含了比较复杂的公式推导过程，个人认为不了解其细节也没有关系、可以跳过这一章(只看“正向传播”一节就行)，只要知道有个经典的反向传播算法可以快速求解 ∂C/∂w、∂C/∂b，从而算出 Δw 和 Δb，使得 ΔC 恒为负、即使得 Loss 越来越小即可。

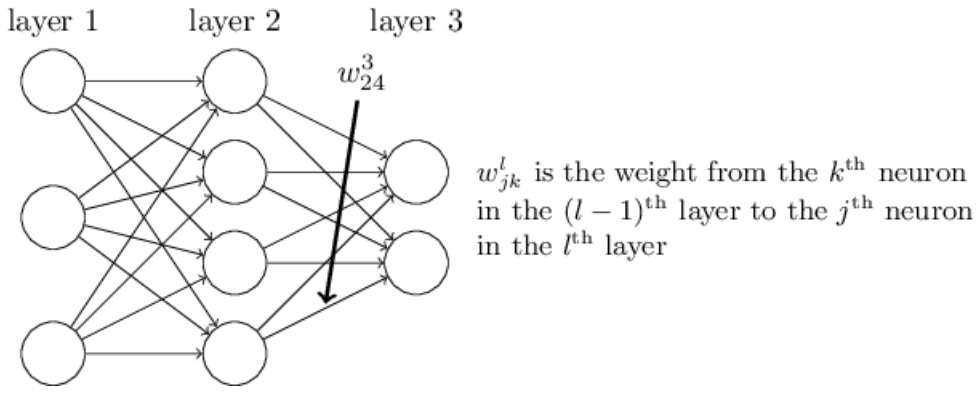
正向传播

正向传播也可以叫作前馈(所以又有个前馈神经网络的词...)，正向传播就是指给神经网络的输入，然后一层一层向前计算输出，最终得到一个输出，这就是正向传播了。

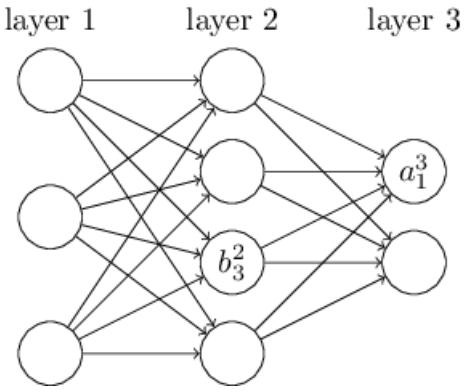
推导前的基本定义

w、a、b 的定义

我们使用 wljk 表示从 (l−1)th 层的 kth 个神经元到 (l)th 层的 jth 个神经元的链接上的权重。例如，下图给出了第二隐藏层的第四个神经元到第三隐藏层的第二个神经元的链接上的权重：



我们使用 blj 表示在 lth 层 jth 个神经元的偏差，使用 alj 表示 lth 层 jth 个神经元的激活值。下面的图清楚地解释了这样表示的含义：



基于上面的定义，可以写出**关于单个神经元激活值 alj 的公式，其中 sum(l-1)表示(l−1)th 层的神经元数量：**

$$a_j^l = \sigma\Big(\sum_{k=1}^{sum(l-1)} w_{jk}^l a_k^{l-1} + b_j^l \Big)$$

上面 w 的表示方法或许很奇怪，但我们把它写成矩阵形式或许就能发现它的妙处了。用 wl 矩阵来表示第(l)th 层的 w 的值，用 j 作为行，k 行为列，那么上面的神经网络中的 w3 就可以写成：

$$w^3 = \begin{bmatrix} w_{11}^3 & w_{12}^3 & w_{13}^3 & w_{14}^3 \\ w_{21}^3 & w_{22}^3 & w_{23}^3 & w_{24}^3 \end{bmatrix}$$

那么也可以用 al 矩阵来表示第(l)th 层的 a 的值，用 j 作为行，但只有一列，那么 al 其实是一个列向量。那么上面的 a2 可以写成下面非常形象的列向量形式：

$$a^2 = \begin{bmatrix} a_1^2 \\ a_2^2 \\ a_3^2 \\ a_4^2 \end{bmatrix}$$

同理，b3 可以也可以写成一个列向量：

$$b^3 = \begin{bmatrix} b_1^3 \\ b_2^3 \end{bmatrix}$$

那么由上面的单个神经元激活值 alj 的公式，可以得出 al 矩阵的公式：

$$a^l = \sigma(w^l a^{l-1} + b^l)$$

单个神经元的带权输入 zlj

从上面的公式中可以提取出一个中间量 zlj：

$$z_j^l = \sum_{k=1}^{sum(l-1)} w_{jk}^l a_k^{l-1} + b_j^l \qquad a_j^l = \sigma(z_j^l)$$

当然也可以简写成矩阵形式：

$$z^l = w^l a^{l-1} + b^l \qquad a^l = \sigma(z^l)$$

zlj 其实就是第 l 层第 j 个神经元的激活函数带权输入。

单组数据的损失

前面介绍了损失函数，那么对于某一组输入，其损失(大写的“L”表示输出层)可以写作如下公式（这里比上面的 Loss 公式少了个 n，因为这里只考虑一组输入，而上面的 Loss 设定是考虑 n 组数据）。

$$C = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{sum(L)} (a_j^L - y_j)^2$$

这个公式同样可以写成矩阵的形式，这里用到了矩阵的模（可以看附录），模的平方即为向量各元素的平方和。

$$C = \frac{1}{2} \|a^L - y\|^2$$

单个神经元的误差 δ lj 测试

定义 l 层的第 jth 个神经元上的误差 δ lj 为：

$$\delta_j^l = \frac{\partial C}{\partial z_j^l}$$

然后可以再推演两步：

$$\delta_j^l = \frac{\partial C}{\partial z_j^l} = \frac{\partial C}{\partial a_j^l} \frac{\partial a_j^l}{\partial z_j^l} = \frac{\partial C}{\partial a_j^l} \sigma'(z_j^l)$$

推导

输出层的误差矩阵

由上面的单个神经元误差公式，可以得出输出层误差矩阵公式（**注意这里使用大写的“L”表示输出层**，圆圈表示的 Hadamard 乘积）：

$$\because \delta_j^L = \frac{\partial C}{\partial z_j^L} = \frac{\partial C}{\partial a_j^L}\frac{\partial a_j^L}{\partial z_j^L}$$

$$\therefore \delta^L = \frac{\partial C}{\partial a^L} \odot \frac{\partial a^L}{\partial z^L}$$

而由于我们采用的损失函数非常容易求出 C 对 aL 的导，所以公式可以进一步简化成：

$$\delta^L = (a^L - y) \odot \sigma'(z^L)$$

某一层的误差矩阵

首先推导下单个神经元误差 δ lj 与下一层(l+1 层)的关系：

$$\begin{aligned}
\delta_j^l = \frac{\partial C}{\partial z_j^l} &= \sum_{k=1}^{sum(l+1)} \frac{\partial C}{\partial z^{l+1}_k}\frac{\partial z^{l+1}_k}{\partial z_j^l} \\
&= \sum_{k=1}^{sum(l+1)} \frac{\partial C}{\partial z^{l+1}_k}\frac{\partial z^{l+1}_k}{\partial a_j^l}\frac{\partial a_j^l}{\partial z_j^l} \\
&= \sum_{k=1}^{sum(l+1)} \delta_k^{l+1}\frac{\partial (w^{l+1}_{kj} a_j^l + b^{l+1}_k)}{\partial a_j^l}\sigma'(z_j^l) \\
&= \sum_{k=1}^{sum(l+1)} \delta_k^{l+1} w_{kj}^{l+1}\sigma'(z_j^l)
\end{aligned}$$

上面推导中比较难理解的可能是累加 k 的由来，这是因为第 lth 层第 jth 个神经元会影响到第(l+1)th 层的所有神经元，所以在反向计算偏导时需要考虑第(l+1)th 层的所有神经元。

然后可以得出第 lth 层的误差矩阵（向量） δ l 的公式：

$$\delta^l = ((w^{l+1})^T \delta^{l+1}) \odot \sigma'(z^l)$$

这次变换出现了矩阵转置，可能也比较难以理解其由来。仔细观察上面 wkj 会发现其中的 j 与 k 的顺序与 w 的原始定义中的顺序发生了对调，这可以理解成转置的原因。自己拿一个示例演算一下也能发现从单个神经元误差到某层神经元的误差矩阵变换时的规律。

误差与权重 w 的关系

在得到了单个神经元的误差之后，再来看看误差与 w 的关系：

$$\frac{\partial C}{\partial w_{jk}^l} = \frac{\partial C}{\partial z_j^l}\frac{\partial z_j^l}{\partial w_{jk}^l} = \delta_j^l \frac{\partial (w_{jk}^l a^{l-1}_k + b_j^l)}{\partial w_{jk}^l} = a_k^{l-1}\delta_j^l$$

和上节的推演一样，若写成矩阵，则是如下形式：

$$\frac{\partial C}{\partial w^l} = \delta^l (a^{l-1})^T$$

误差与偏差 b 的关系

与上面 w 的推导过程一致，容易得到误差与 b 的关系：

$$\frac{\partial C}{\partial b_j^l} = \delta_j^l$$

这个的矩阵形式就很简单了：

$$\frac{\partial C}{\partial b^l} = \delta^l$$

总结

通过上面惨无人道的推导，可以发现在经过一次正向传播之后，可以通过输出层的误差、快速求解出 C 对每个 w 和 b 的偏导，即 ∂C/∂w、∂C/∂b，再对每个 w 和 b 加上 Δw、Δb，从而使得“球往下滚”，C、即 Loss 越来越小，神经网络在朝着我们期望的方向进行调整。

BP 神经网络的训练流程

基于上面的知识，我们现在可以总结出训练一个神经网络的全流程：

初始化神经网络，对每个神经元的 w 和 b 赋予随机值；

输入训练样本集合，对于每个样本，将输入给到神经网络的输入层，进行一次正向传播得到输出层各个神经元的输出值；

求出输出层的误差，再通过反向传播算法，向后求出每一层(的每个神经元)的误差；

通过误差可以得出每个神经元的 ∂C/∂w、∂C/∂b，再乘上负的学习率(-η)，就得到了 Δw、Δb，将每个神经元的 w 和 b 更新为 w+Δw、b+Δb；

完成训练之后，一般情况下我们都能得到一个损失比较小的神经网络。

参考文献：

https://blog.csdn.net/u014162133/article/details/81181194
https://www.jianshu.com/p/a088a9d8307f
https://www.jianshu.com/p/a088a9d8307f