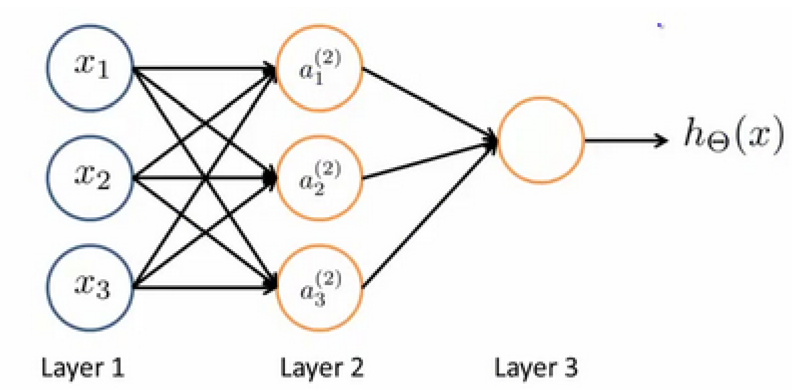
Neural Network

Introduction

在之前，我们提到了多项式回归，当我们的特征数不断增加的时候，我们所需要的计算量将会阶乘式的增长，假设我们有100个特征值，我们只考虑他们的二次项，那也会有约5000种选择，这样的计算量是不可忍受的。为了有效地处理这类问题，我们可以使用神经网络（Neural Network）

Model Representation

神经网络算法的模型和人脑的神经元类似：



一个简单的神经网络模型如上图所示，分为Input Layer（第一层）, Hidden Layer（中间所有层）, Output Layer（最后一层），一般来说每次层都会有一个bias unit（固定为1）
我们用$a_i^{(j)}$来表示第j层的第i个单元，用$\Theta^{(j)}$表示控制第j层到第$j+1$层的参数矩阵，用$g(x)$表示我们的激活函数（Sigmoid function）于是在上图的模型中，我们有如下等式：

$$
\begin{aligned}
a_1^{(2)} &= g(\Theta_{10}^{(1)}x_0 + \Theta_{11}^{(1)}x_1 + \Theta_{12}^{(1)}x_2 + \Theta_{13}^{(1)}x_3) \\
a_2^{(2)} &= g(\Theta_{20}^{(1)}x_0 + \Theta_{21}^{(1)}x_1 + \Theta_{22}^{(1)}x_2 + \Theta_{23}^{(1)}x_3) \\
a_3^{(2)} &= g(\Theta_{30}^{(1)}x_0 + \Theta_{31}^{(1)}x_1 + \Theta_{32}^{(1)}x_2 + \Theta_{33}^{(1)}x_3) \\
h_\Theta(x) = a_1^{(3)} &= g(\Theta_{10}^{(2)}a_0^{(2)} + \Theta_{11}^{(2)}a_1^{(2)} + \Theta_{13}^{(2)}a_3^{(2)} + \Theta_{13}^{(2)}a_3^{(2)})
\end{aligned}
$$

上述等式可以用矩阵来表示：

$$z^{(2)} = \Theta^{(1)}x$$
$$a^{(2)} = g(z^{(2)})$$

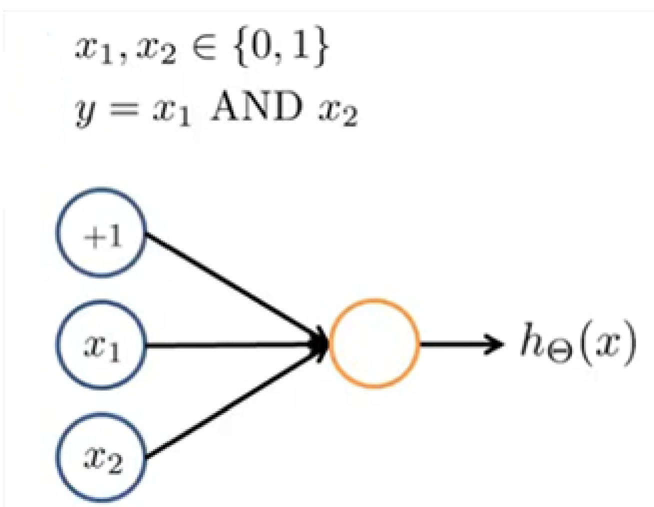
一般的，我们在神经网络中从j层到$j+1$层有如下的形式：

$$Add : a_0^{(j)} = 0$$
$$z^{(j+1)} = \Theta^{(j)}a^{(j)}$$
$$a^{(j+1)} = g(z^{(j+1)})$$

这个过程被称为神经网络的前向传播（forward propagation）。
如果我们只看Layer2到Layer3的这个过程，不难发现这个过程和Logistic Regression类似，它对特征值$a_0^{(2)}, a_1^{(2)}, a_2^{(2)}, a_3^{(2)}$进行线性组合，然后经过激活函数，对我们的$h_\Theta(x)$做一个估计。神经网络没有对输入层的特征值进行逻辑回归，而是对自己生成的特征值进行回归，这也就意味着我们可以通过参数矩阵来形成一些比较高级、复杂的特征值使用。

Example

下面给出利用神经网络模型实现一些非线性函数的例子：
首先我们需要实现一个AND函数：



我们的权重矩阵可以设为：

$$\Theta^{(1)} = (-30, 20, 20)$$

这样对应的结果是（$g(4.6) \approx 0.99, g(-4.6) \approx 0.01$）：

x_1	x_2	$h_\Theta(x)$
0	0	$g(-30) \approx 0$
0	1	$g(-10) \approx 0$
1	0	$g(-10) \approx 0$
1	1	$g(10) \approx 1$

如果我们要实现一个OR函数的话，可以让$\Theta^{(1)} = (-10, 20, 20)$

x_1	x_2	$h_\Theta(x)$
0	0	$g(-10) \approx 0$
0	1	$g(10) \approx 1$
1	0	$g(10) \approx 1$
1	1	$g(30) \approx 1$

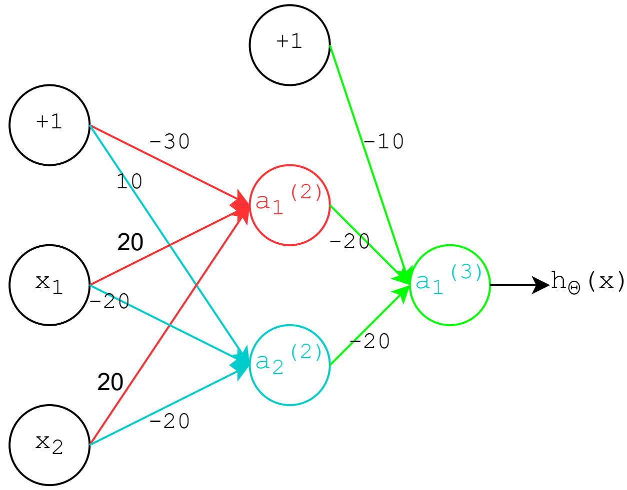
实现NOT函数时，只需要一个特征值，参数矩阵设置为$\Theta^{(1)} = (10, -20)$

x_1	$h_\Theta(x)$
0	$g(10) \approx 1$
1	$g(-10) \approx 0$

如果要实现$y = \overline{x}_1 \wedge \overline{x}_2$，则可以令权重矩阵为$\Theta^{(1)} = (10, -20, -20)$

x_1	x_2	$h_\Theta(x)$
0	0	$g(10) \approx 1$
0	1	$g(-10) \approx 0$
1	0	$g(-10) \approx 0$
1	1	$g(-30) \approx 0$

如果我们需要实现XNOR的话，注意到$x_1 \odot x_2 = (x_1 \wedge x_2) \vee (\overline{x}_1 \wedge \overline{x}_2))$，在这里我们可以使用多层神经网络，先分别实现$x_1 \wedge x_2$和$\overline{x}_1 \wedge \overline{x}_2$，再用or进行组合：



真值表如下：

x_1	x_2	$a_1^{(2)}$	$a_2^{(2)}$	$h_\Theta(x)$
0	0	0	1	1
0	1	0	0	1
1	0	0	0	1
1	1	1	0	1

Multiclass Classification

和在logistic regression中介绍的类似，在神经网络中，我们可以使用这样的方法解决多分类问题。假设我们要处理一个四分类的问题，在之前我们会把y赋值为1,2,3,4表示四种不同的类别，在神经网络中，我们更倾向于用向量$(1,0,0,0)^T$,$(0,1,0,0)^T$, ..., $(0,0,0,1)^T$来表示四种分类，也就是说，我们的输出层存在四个输出：

Learning

回顾Logistic Regression的cost function：

$$J(\theta) = -\frac{1}{m}[\sum_{i=1}^{m}(y^{(i)}\log h_\theta(x^{(i)}) + (1-y^{(i)})\log(1-h_\theta(x^{(i)}))] + \frac{\lambda}{2m}\sum_{j=1}^{n}\theta_j^2$$

因为实际上神经网络就是多层的逻辑回归，所以神经网络的cost function可以表示为：

$$h_\Theta(x) \in \mathbb{R}^k \ (h_\Theta(x))_i \triangleq i^{th} \text{ output}$$

$$J(\Theta) = -\frac{1}{m}[\sum_{i=1}^{m}\sum_{k=1}^{K} y^{(i)}\log(h_\theta(x^{(i)}))_k + (1-y^{(i)})\log(1-(h_\theta(x^{(i)}))_k))] + \frac{\lambda}{2m}\sum_{l=1}^{L-1}\sum_{i=1}^{s_l}\sum_{j=1}^{s_{l+1}}(\Theta_{ji}^{(l)})^2$$

问题是如何让这个cost function最小化，依照惯例我们使用梯度下降算法。

Backpropagation Algorithm

为了使用梯度下降算法实现$\arg\min_\Theta J(\Theta)$，我们需要计算$J(\Theta)$和$\frac{\partial}{\partial\Theta_{ij}^{(l)}}J(\Theta)$，这里用到的算法就是backpropagation algorithm.

我们定义l层第j个节点的误差为：

$$\delta_j^{(l)} = \frac{\partial}{\partial z_j^{(l)}}cost(i)$$

$$cost(i) = -(y^{(i)}\log h_\theta(x^{(i)}) + (1-y^{(i)})\log(1-h_\theta(x^{(i)}))$$

对于输出层，我们有：

$$\delta_j^{(L)} = \frac{\partial}{\partial z_j^{(L)}}cost(i) = \sum_{k=1}^{K}\frac{\partial}{\partial a_k^{(L)}}cost(i)\cdot\frac{\partial a_k^{(L)}}{\partial z_j^{(L)}}$$

因为第j个节点的误差和其他节点无关，所以有：

$$
\begin{aligned}
\delta_j^{(L)} &= \frac{\partial}{\partial a_j^{(L)}} cost(i) \cdot \frac{\partial a_j^{(L)}}{\partial z_j^{(L)}} \\
&= -(\frac{y_j}{a_j^{(L)}} - \frac{1-y_j}{1-a_j^{(L)}}) \cdot a_j^{(L)}(1-a_j^{(L)}) \\
&= a_j^{(L)} - y_j
\end{aligned}
$$

用向量表示就是：

$$\delta^{(L)} = a^{(L)} - y$$

同样的，对于隐藏层我们可以推导出：

$$\delta^{(l)} = (\Theta^{(l)})^T \delta^{(l+1)} .* g'(z^{(l)})$$

于是我们得到了backpropagation算法：

Set $\Delta_{ij}^{(l)} = 0$ (for all i, j, l).
For $i = 1$ to m
  Set $a^{(1)} = x^{(i)}$
  Perform forward propagation to compute $a^{(l)}$ for $l = 2, 3, ..., L$
  Using $y^{(i)}$ to compute $\delta^{(L)} = a^{(L)} - y^{(i)}$
  Compute $\delta^{(L-1)}, \delta^{(L-2)}, ..., \delta^{(2)}$
  $\Delta_{ij}^{l} := \Delta_{ij}^{l} + a_j^{(l)} \delta_i^{(l+1)}$
$D_{ij}^{(l)} = \frac{1}{m} \Delta_{ij}^{l} + \lambda \Theta_{ij}^{(l)},\ if\ j \neq 0$
$D_{ij}^{(l)} = \frac{1}{m} \Delta_{ij}^{l},\ if\ j = 0$

其中$D_{ij}^{(l)}$即我们想要计算的$\frac{\partial}{\partial \Theta_{ij}^{(l)}} J(\Theta)$

Gradient Checking

在实际操作中，我们需要检验我们的backpropagation算法是否正确，这时候需要进行梯度检验，梯度检验的核心思想就是去用，导数估计值和我们得出的偏导数相比较，在数值计算中，有一种比较常用的导数值估计的方法：

$$f'(x) = \frac{f(x+\epsilon) - f(x-\epsilon)}{2\epsilon}$$

一般来说，我们取$\epsilon \approx 10^{-4}$，我们需要检查的是$D_{ij}^{(l)}$是否和我们估算出来的导数值相近。需要注意的是，如果我们验证好了我们算法的正确性，我们应该关闭梯度检验，否则代码的运行速度将大幅减慢。

Random Initialization

在实现神经网络算法的时候，如果我们把权重矩阵预设为0的话，实际上我们并不能得到很好的结果，因为神经网络会出现高度的冗余，很多神经元会计算相同的内容，为了避免这样的情况，我们需要对权重矩阵进行随机赋值，使得$\forall i, j, l, -\epsilon \le \Theta_{ij}^{(l)} \le \epsilon$（$\epsilon$为接近0的一个小量）