深度学习

输出层与代价函数

Author:WangQi
Email:wangqikaixin@gmail.com

均方误差代价函数

公式 $$J = \frac{1}{2m}\sum_{i=1}^{m}||y^{(i)} - h_{w,b}^{(i)}(x)||^2$$

适用范围 线性激活函数的输出。

优点 分类与回归问题均可用。

缺点 在某些情况下会出现残差衰减。

Author:WangQi
Email:wangqikaixin@gmail.com

sigmoid输出层

公式 $$h=\frac{1}{1+e^{-z}}$$

作用 作为输出层激活可用来完成二分类任务。

意义 将输入z变换为输出是正类的相对可能性

代价函数 通常配合交叉熵代价函数使用

Author:WangQi
Email:wangqikaixin@gmail.com

sigmoid函数与几率的关系

如果我们用h表示正类(1-h)表示负类，则**几率(Odds)**的定义为h/(1-h)。对几率取对数可以得到**对数几率(Logit odds)**为ln(h/(1-h))，对数几率有很好的数学特性，它是任意阶可导的凸函数。我们把sigmoid函数表达式带入对数几率式子可得：

$$\ln \frac{h}{1-h} = z$$

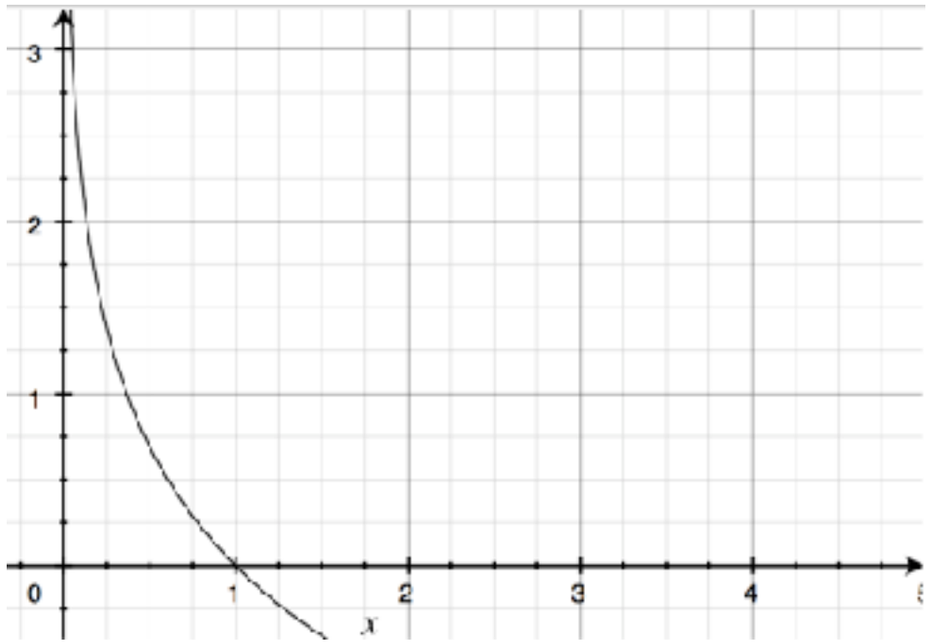
可以得到：训练完成的神经网络，其输出层的输入表征一个几率，sigmoid函数相当于将几率转化为了结果为正类的概率。

Author:WangQi
Email:wangqikaixin@gmail.com

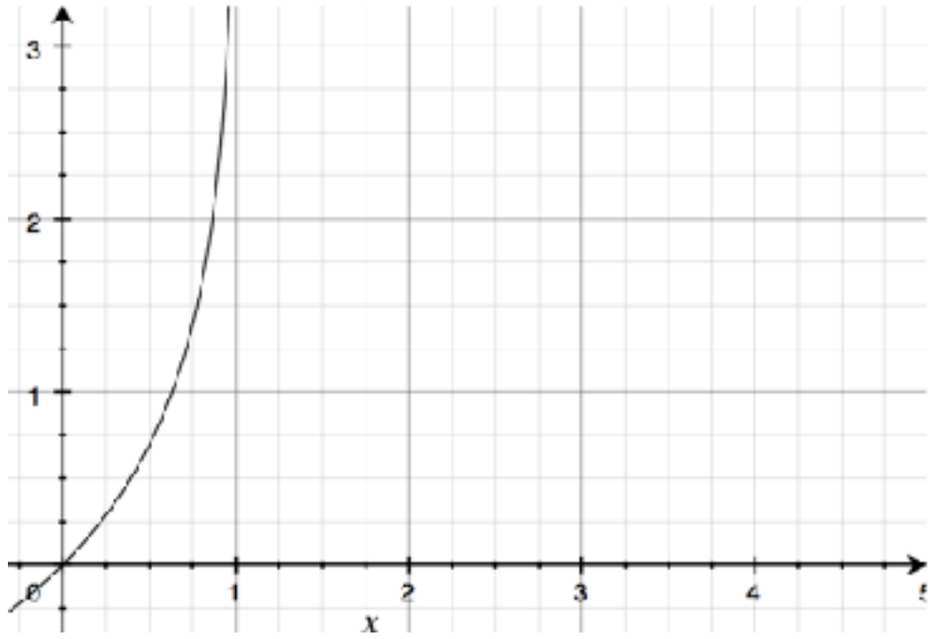
交叉熵代价函数

$$J = -\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}[y_i \ln h(x_i) + (1 - y_i)\ln(1 - h(x_i))]$$

交叉熵可以用来比较两个概率的相似性，在机器学习中，常用来衡量预测值与标记值的误差。误差越大，代价越大。



当y=1时，J的图像。



当y=0，J的图像。

Author:WangQi
Email:wangqikaixin@gmail.com

利用极大似然估计得到代价函数

Author:WangQi
Email:wangqikaixin@gmail.com

若将标记y视为类后验概率估计，则有:

$$p(y=1|x)=h$$

$$p(y=0|x)=1-h$$

对给定数据集对模型取**对数似然(Log-likelihood)**可得:

$$l=\sum_{i=1}^{m}\ln p(y_i|x_i;w,b)$$

根据类后验概率估计的式子即可以得到:

$$p(y_i|x_i;w,b)=y_i p(y=1|x_i)+(1-y_i)p(y=0|x_i)$$

将上式带入对数似然函数，并根据类后验概率估计可得:

$$l=\sum_{i=1}^{m}(y_i h(x_i)+(1-y_i)(1-h(x_i)))$$

我们的目标是最大化平均对数似然，也就是最小化负的平均对数似然，即:

$$min(-\hat{l})=-\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}[y_i\ln h(x_i)+(1-y_i)\ln(1-h(x_i))]=J$$

Author:WangQi
Email:wangqikaixin@gmail.com

交叉熵代价函数的梯度下降

我们以单样本为例，代价函数为：

$$J = -y \ln h(x) + (y-1) \ln (1-h(x))$$

为了方便推导，下面我们需要定义变量。

Author:WangQi
Email:wangqikaixin@gmail.com

l表示层索引，L表示最后一层的索引。j、k均表示某一层神经元的索引。N表示神经网络每一层的神经元数量。w表示连接权重，b表示偏置值。

$w_{jk}^{(l)}$表示第l层的第j个神经元与第$(l-1)$层的第k个神经元的连接权重。

$b_j^{(l)}$表示第l层的第j个神经元的偏置值。

$N^{(l)}$表示第l层神经元的数量。其中$N^{(L)}$表示最后一层神经元的数量。

$$z_j^{(l)} = \sum_{k=1}^{N^{(l-1)}} w_{jk}^{(l)} a_k^{(l-1)} + b_j^{(l)}$$表示第l层第j个神经元的输入。

$a_j^l = \sigma(z_j^{(l)})$表示第$l$层第$j$个神经元的输出。其中$\sigma$表示$sigmoid$激活函数。

输出层的残差表示为：

$$\delta^{(L)} = \frac{\partial J}{\partial z^{(L)}} = \frac{\partial J}{\partial a^{(L)}} \frac{\partial a^{(L)}}{\partial z^{(L)}} = \sigma(z^{(L)}) - y$$

输出层的连接权重的梯度：

$$\frac{\partial J}{\partial w_{jk}^{(L)}} = \frac{\partial J}{\partial z_j^{(L)}} \frac{\partial z_j^{(L)}}{\partial w_{jk}^{(L)}}$$

$$= (\sigma(z_j^{(L)}) - y) \cdot \frac{\partial}{\partial w_{jk}^{(L)}} (\sum_{K=1}^{N^{L-1}} (w_{jK}^L a_K^{(L-1)} + b_j^{(L)}))$$

$$= (\sigma(z_j^{(L)}) - y) a_k^{(L-1)}$$

同理，输出层偏置的梯度：

$$\frac{\partial J}{\partial b_j^{(L)}} = \sigma(z_j^{(L)}) - y$$

Author:WangQi
Email:wangqikaixin@gmail.com

softmax输出层

公式 $$h_i = \frac{e^{z_i}}{\sum_j e^{z_j}}$$

作用 二分类或者多分类任务的输出层激活函数。

意义 将输入排序，并转换为概率表示。

代价函数 通常配合对数似然代价函数来表示代价。

Author:WangQi
Email:wangqikaixin@gmail.com

对数似然代价函数

$$J = -\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{N^{(L)}} y_j^{(i)} \ln h_j^{(i)}(x)$$

对数似然函数的梯度下降

我们首先将代价函数转化为单样本的代价函数：

$$J = -\sum_{j=1}^{N^{(L)}} y_j \ln h_j(x)$$

Author:WangQi
Email:wangqikaixin@gmail.com

输出层的残差表示为：

$$\delta_j^{(L)} = \frac{\partial J}{\partial z_j^{(L)}} = \frac{\partial J}{\partial a_j^{(L)}} \frac{\partial a_j^{(L)}}{\partial z_j^{(L)}} = -y_j \cdot \frac{1}{a_j^{(L)}} \cdot \frac{\partial J}{\partial z_j^{(L)}}$$

输出层连接权重的梯度为：

$$\frac{\partial J}{\partial w_{jk}^{(L)}} = \frac{\partial J}{\partial z_j^{(L)}} \frac{\partial z_{jk}^{(L)}}{\partial w_{jk}^{(L)}} = \delta_j^{(L)} \cdot \frac{\partial}{\partial w_{jk}^{(L)}} \sum_{K=1}^{N^{L-1}} (w_{jK}^{(L)} a_K^{(L-1)} + b_j^{(L)}) = \delta_j^{(L)} \cdot a_k^{(L-1)}$$

同理可得输出偏置的梯度：

$$\frac{\partial J}{\partial b_j^{(L)}} = \delta_j^{(L)}$$

Author:WangQi
Email:wangqikaixin@gmail.com

代价函数适用范围

回归问题 → 最小二乘估计 → 均方误差代价函数

二分类问题 → 交叉熵代价函数

二分类问题 → 极大似然估计 → 对数似然代价函数

交叉熵代价函数 等价 对数似然代价函数

多分类问题 → 极大似然估计 → 对数似然代价函数

小节

- 均方误差代价函数可以作为回归任务的代价函数，例如输出层使用线性激活函数。其用于分类任务可用，但不太合适。
- sigmoid函数在输出层的作用是将几率转化为概率。
- softmax函数在输出层的作用是将多个输出归一化，并转化为概率。输入越大，概率越大。
- 当遇到二分类任务时，可以选择sigmoid函数或者softmax函数作为输出层的激活函数。
- 当解决多分类任务时，选择softmax函数作为输出层激活函数。
- 输出层使用sigmoid激活函数时，输出层有且仅有一个神经元。其最适合的代价函数是交叉熵代价函数。
- 输出层使用softmax激活函数时，最适合的代价函数时对数似然代价函数。
- 交叉熵代价函数与对数似然代价函数形式上一致。但来源不同。

Author:WangQi
Email:wangqikaixin@gmail.com

THANKS

Author:WangQi
Email:wangqikaixin@gmail.com