局部连接来减参，权值共享肩并肩（深度学习入门系列之十一） (https://yq.aliyun.com/articles/159710)

12.1 两个看似闲扯的问题

在开讲本章内容之前，先请你思考两个问题呗：第一个问题，你能用直线画出一张漂亮的笑脸吗？第二个问题是，你知道那副著名的对联：“诸葛一生唯谨慎，吕端大事不糊涂”，说得是什么典故吗？

如果你不是抬杠的话，我想你第一个问题的答案，应该是不能。因为直线的表现力非常有限，只有曲线才能画出更美的线条。因此，才有英国画家和美学家威廉•荷加兹(William Hogarth,1697~1764)这个的结论：“世界上最美的线条是曲线”。


图1 诸葛亮的“过度拟合”

第二问题说的是，诸葛当然是指“诸葛亮”。其人掌军理政之谨慎，史家已有共识。但过于谨慎是有代价的，那就是面临新情况做决策时，考虑因素过多，思前顾后，从而使其判断力（或称之为预测力）大打折扣。而同样身居高位的吕端则不同。吕端是宋朝一个名宰相，别看他平时是糊里糊涂的，很多鸡零狗碎之事，他从不斤斤计较。但一旦涉及原则性、重要关键决策点时，吕端从不马虎，其风格有点像“大行不顾细谨”。

12.2 追寻问题的本质

前面我们提了两个问题，看似闲扯，其实不然。因为它们的答案都和今天的主题相关。问题一的答案其实是想说明一个结论，就是线性的事物，表达能力不强，而非线性则相反。我们知道，从宏观来将，在本质上，人工神经网络就分为两大类层：显层和隐层。“显层”就是我们能感知到的输入层和输出层，而“隐层”则是除了输入输出之外的无法被我们感知的层，它可以理解为数据的内在表达[1]。

在第二章中 (https://yq.aliyun.com/articles/88300)，我们已经提到，如果“隐层”有足够多的神经元，那么神经网络能够以任意精度逼近任意复杂度的连续函数，这就是大名鼎鼎的通用近似定理（Universal Approximation Theorem）[2]。通过在第八章 (https://yq.aliyun.com/articles/110025)BP算法的讲解中，我们可以看到，神经元与神经元的连接都是基于权值的线性组合。我们知道，线性的组合依然是线性的，那网络的表达能力就非常有限了。这样一来，通用近似定理又是如何起作用的呢？这就得请“激活”函数出马了？神经元之间的连接是线性的，但激活函数可不一定是线性的啊，有了非线性的激活层在，多么玄妙的函数，我们都能近似表征出来。所以，在卷积神经网络中，激活层是必须保留的。

第二个问题的答案，其实是想说明深度学习训练的两大难点：过拟合（overfitting）和欠拟合（underfitting）。那什么是过拟合和欠拟合呢？图12-2可形象地说明这两个概念的差别。


图12-2 过拟合与欠拟合的直观类比

“欠拟合”比较容易理解，就是样本不够，或学习算法不精，连已有数据中的特征都没有学习好，自然当面对新样本做预测时，效果肯定也好不到哪里去。比如说，在图12-2中（右下图），若果仅仅把样本中的“四条腿”当作青蛙的特征，这“欠缺”的特征，就会把一只四条腿的壁虎也当作青蛙。其实，欠拟合比较容易克服，比如在决策树算法中扩展分枝，再比如在神经网络中增加训练的轮数，从而可以更加“细腻”地学习样本种的特征。

相比而言，要克服过拟合，就相对困难得多。在过拟合里，构建的模型必须一丝不苟地反映已知的所有数据，但这样一来，它对未知数据（新样本）的预测能力就会比较差。

这是因为，所谓的“已知”数据，其实也是有误差的！精准的拟合会把这些数据的误差给放大。从而导致，拟合得越精确，面对新样本时，预测的效果反而会更加糟糕。比如说图12-2中（右上图），误把背上斑点当做青蛙的特征，当新来的样本青蛙，仅仅由于背上没有斑点（不同于样本数据），就被判定为非青蛙，这岂不是很荒诞？“诸葛一生唯谨慎”，说的就是诸葛亮陷入“过拟合”状态，他容易被很多细节所迷惑，自然决策的质量就会受到影响。

“吕端大事不糊涂”说的就是，小事情上“难得糊涂”，大事情上“毫不含糊”。遇到新情况，吕端就不会受很多细节所左右。用机器学习的术语来讲，吕端的“泛化能力”比较强。

卷积神经网络也追求泛化（即防过拟合）能力，它是如何做到的呢？自然也得学习“吕端”的行为——别管那么多！

针对神经网络，就是再次降低数据量，让系统少学点。不要认为，训练数据越“全面”越好。想一想人类的学习就知道怎么回事了。当孩子还小正处于学习阶段时，妈妈们的浓浓爱意，总想通过“事无巨细”地照顾孩子表达出来。但在这种环境下“学习”出来的孩子，一旦踏上社会，适应新环境的能力就差很多，并不值得提倡。神经网络也是如此。

那该如何降低数据量呢？最简单的策略自然就是“采样（sampling）”了。其实，**采样的本质就是力图以合理的方式“以偏概全”。**这样一来，数据量自然就降低了。

在卷积神经网络中，采样是针对若干个相邻的神经元而言的，因此也称为“亚采样（Subsampling）”。可能是“亚采样”这个词的逼格不够高吧，于是研究者们又给它取了个更难懂的词：“池化（Pooling）”。“池化”其实仅仅是个字面的翻译，远没达不到“信达雅”的要求，如果非要向“采样”的含义靠拢，中国那句古话，“弱水三千只取一瓢”，似乎更有韵味。南京大学周志华老师就将其的意译为“汇合”，这样的翻译似乎更加传神。但拗不过太多人都把“Pooling”翻译成“池化”，那我们也就“池化”叫下去吧。

接下来，我们就详细说一说激活层和池化层到底是怎么回事吧。

## 12.3 细说激活层

通过前面的铺垫，现在我们应该知道，激活层存在的最大目的，莫过于引入非线性因素，以增加整个网络的表征能力。

这时，选取合适的“激活函数”就显得非常重要了。在前面的章节中，我们提到了常用的激活函数Sigmoid（或tanh函数），也是可用的（如图12-3所示）。

$$f(x)=\frac{1}{1+e^{-x}} \qquad (12\text{-}1)$$

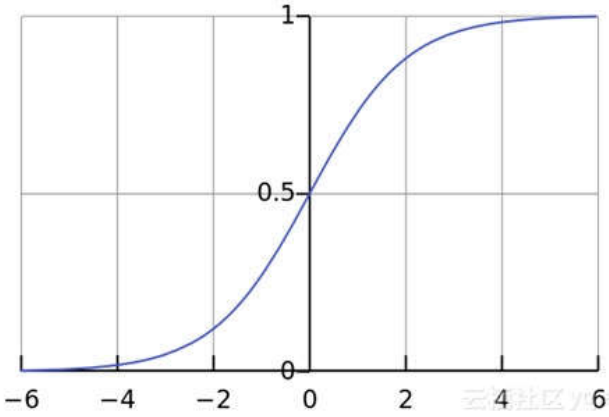



图12-3 激活函数Sigmoid

但Sigmoid之类激活函数有个很大的缺点，就是它的导数值很小。比如说，Sigmoid的导数取值范围仅为[0, 1/4]。且当输入数据（x）很大或者很小的时候，其导数趋都近于0。这就意味着，很容易产生所谓的梯度消失（vanishing gradient）现象。没有了梯度的指导，那么神经网络的参数训练，就如同“无头的苍蝇”，毫无方向感。

因此，如何防止深度神经网络陷入梯度消失，或说如何提升网络的训练效率，一直都是深度学习非常热门的研究课题。目前，在卷积神经网络中，最常用的激活函数久是修正线性单元(Rectified Linear Unit，简称ReLU)。这个激活函数是由Hinton等人2010年提出来的[3]。标准的ReLU函数为f(x)=max(x,0)，即当x>0时，输出x; 当x<=0时，输出0。如图12-4所示，请注意，这是一条曲线啊，只不过它在原点处不够那么圆润而已。

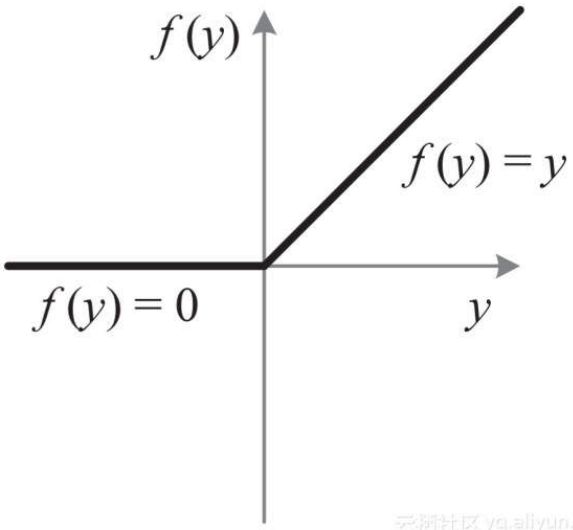



图12-4 激活函数ReLU

不要小看这个看起来有点简陋的模型，其实它的优点还不少。相比于Sigmoid类激活函数，ReLU激活函数的优点主要体现在如下三点。

**（1）单侧抑制。**观察图12-4可见，当输入小于0时，神经元处于抑制状态。反之，当输入大于0，神经元处于激活状态。

**（2）相对宽阔的兴奋边界。**观察图12-3和图12-4可见，Sigmoid的激活态（即f(x)的取值）集中在中间的狭小空间，而ReLU这不同，只要输入大于0，神经元一直都处于激活状态。

**（3）稀疏激活性。**相比于Sigmoid之类的激活函数，稀疏性是ReLU的优势所在[4]。Sigmoid把抑制状态的神经元设置一个非常小的值，但即使这个值再小，后续的计算还少不了它们的参与，计算负担很大。但考察图12-4可知，ReLU直接把抑制态的神经元“简单粗暴”地设置为0，这样一来，就使得这些神经元不再参与后续的计算，从而造成网络的稀疏性，如图12-5所示。

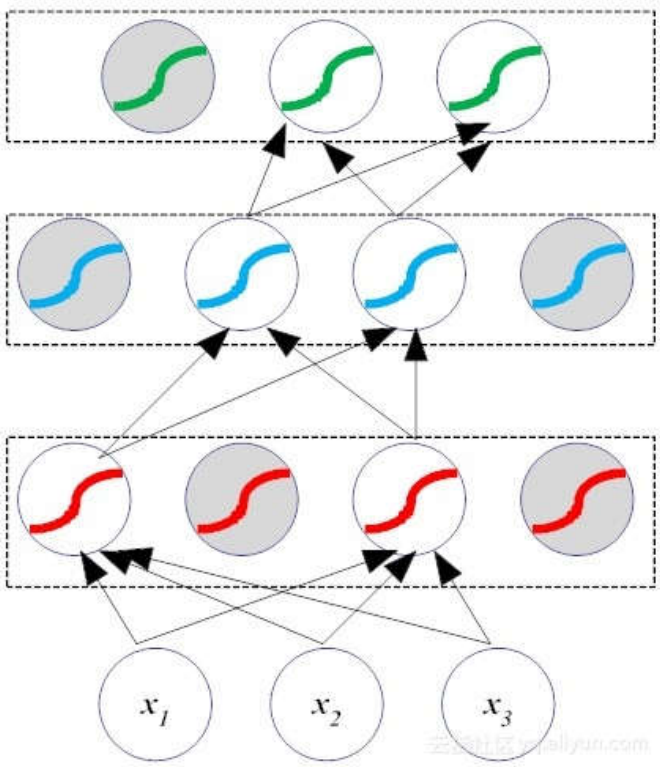



图12-5 ReLU激活函数产生稀疏连接关系

这个细小的变化，让ReLU在实际应用中大放异彩，除了减少了计算量，还减少了参数的相互依存关系（网络瘦身了不少），使其收敛速度远远快于其他激活函数，最后还在一定程度上缓解了过拟合问题的发生（对Dropout机制比较熟悉的读者可能会发现，图12-5和Dropout的迭代过程何其神似！）。ReLU的卓越表现，让深度学习的三位大咖Yann LeCun、Yoshua Bengio和Geoffery Hinton在2015年表示，ReLU是深度学习领域最受欢迎的激活函数。

前面的描述可能还过于抽象，下面我们再用一个更为生动的案例来理解ReLU的操作，图12-6演示了ReLU“修正”前后的特征图谱。

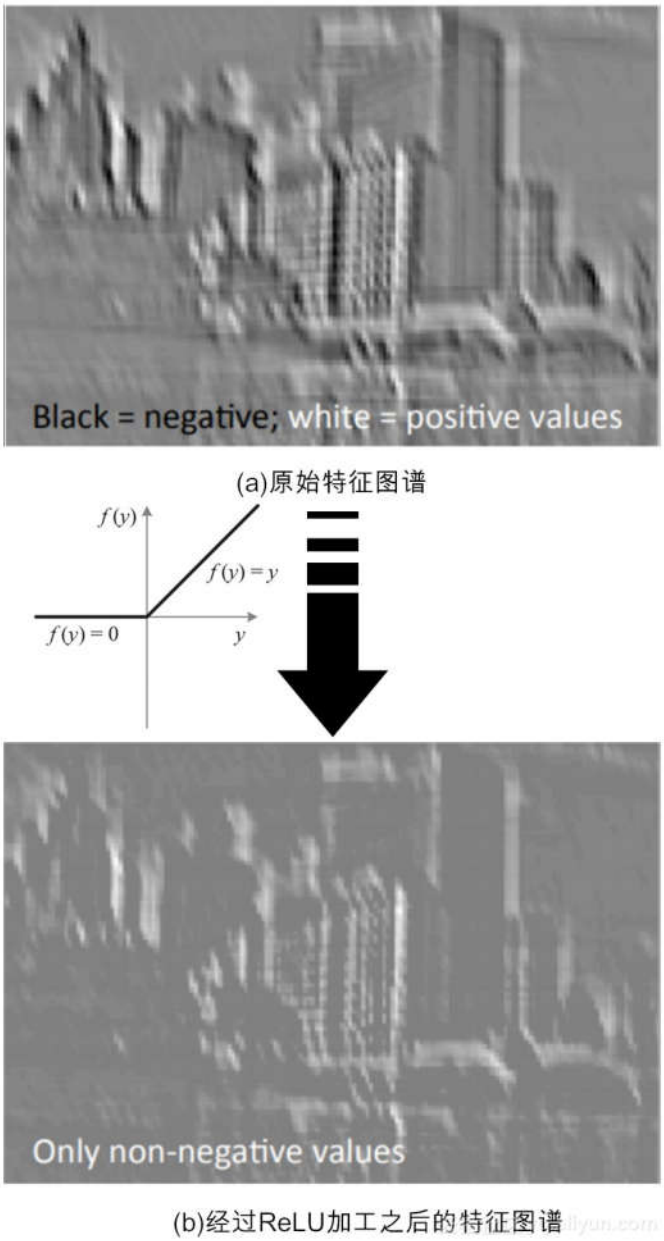



图12-6 ReLU“修正”前后的特征图谱

说到ReLU激活函数有如此神奇作用，其实还有一个原因，那就是这样的模型正好“暗合”生物神经网络工作机理。2003年纽约大学教授Peter Lennie的研究发现[5]，大脑同时被激活的神经元只有1~4%，即神经元同时只对输入信号的少部分选择性响应，大量信号被刻意地屏蔽了，这进一步表明神经元工作的稀疏性。其实，这是容易理解的，因为生物运算也是需要成本的。进化论告诉我们，作为人体最为耗能的器官，大脑尽要可能节能，才能在恶劣的环境中“适者生存”。

当然，LeRU的这种简单直接的处理方式，也带来一些副作用。最突出的问题就是，会导致网络在训练后期表现得非常脆弱，以至于这时的ReLU也被戏称为“死掉的ReLU（dying ReLU）”。目前，也有一些对研究工作对ReLU实施改进，分别提出了一系列诸如leaky-ReLU，random ReLU及PReLU[6]等优化方案，有兴趣的读者可自行前往查阅相关文献。

前面说完了激活层，下面我们再聊聊池化层。

12.4 详解池化层

池化层亦称子采样层，它也是卷积神经网络的另外一个“神来之笔”。通常来说，当卷积层提取目标的某个特征之后，我们都要在两个相邻的卷积层之间安排一个池化层。

池化层函数实际上是一个统计函数。以如图12-7所示的二维数据为例，如果输入数据的维度大小为W×H，给定一个池化过滤器，其大小为w×h。池化函数考察的是在输入数据中，大小为w×h的子区域之内，所有元素具有的某一种特性。常见的统计特性包括最大

值、均值、累加和及L2范数等。池化层函数力图用统计特性反应出来的1个值，来代替原来w×h的整个子区域。

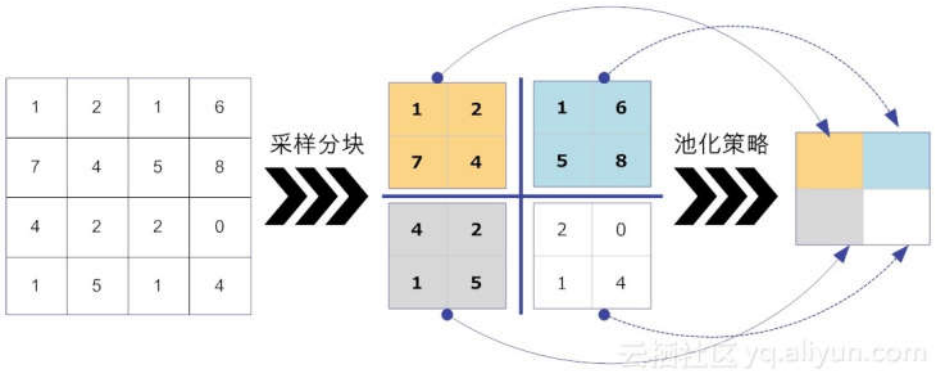



图12-7 池化操作：将池化滤波器内的所有元素用某个统计量来代替

因此，可以这么说，池化层设计的目的主要有两个。最直接的目的，就是降低了下一层待处理的数据量。比如说，当卷积层的输出大小是32×32时，如果池化层过滤器的大小为2×2时，那么经过池化层处理后，输出数据的大小为16×16，也就是说现有的数据量一下子减少到池化前的1/4。当池化层最直接的目的达到了，那么它的间接目的也达到了：减少了参数数量，从而可以预防网络过拟合。

下面我们举例说明常用的池化策略最大化和平均化是如何工作的。我们以一维向量数据[1, 2, 3, 2]为例，来说明两种不同的池化策略在正向传播和方向传播中的差异[7]。

**（1）最大池化函数（max pooling）**

**前向传播操作：**取滤波器最大值作为输出结果，因此有forward(1, 2, 3, 2) = 3.

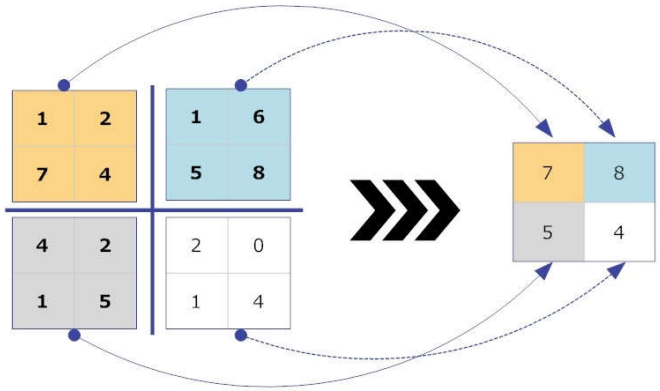
**反向传播操作：**滤波器的最大值不变，其余元素置0。因此有backward(3) = [0, 0, 3, 0]。

**（2）平均池化函数（average pooling）**

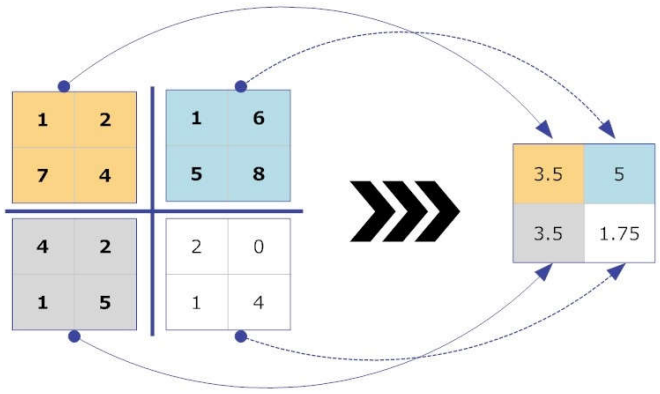
**前向传播操作：**取滤波器范围所有元素的平均值作为数据结果，因此有forward(1, 2, 3, 2) = 2.

**后向传播操作：**滤波器中所有元素的值，都取平均值，因此有backward(2) = [2, 2, 2, 2]。

有了上面的解释，我们很容易得出图12-7中所示的池化策略前向传播结果，如图12-8所示。




（a）最大池化策略




（b）均值池化策略 

图12-8 两种不同的池化策略结果比对图

阅读到此，读者可能会有个疑问？对于处理图片而言，如果池化层的过滤器2×2，就相当于将上一层4个像素合并到一个1像素。如果过滤器的大小是6×6，那就相当于将上一层36个像素合并到一个1像素，这也岂不是让图像更加模糊了。的确是这样，通过池化操作后，原始图像就好像被打上了一层马赛克，如图12-9所示。对池化如何影响可视化图像的理论分析，感兴趣的读者可参阅LeCun团队的论文[8]。

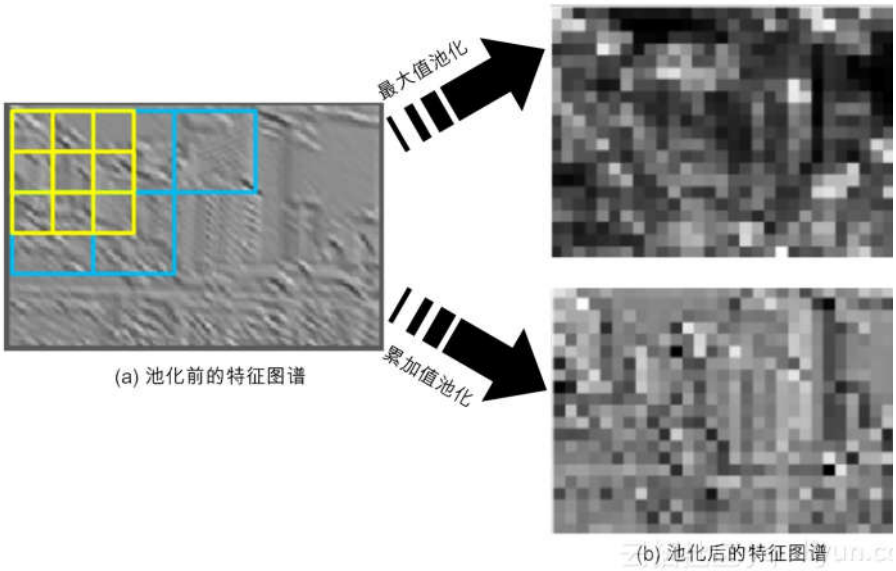



图12-9 池化前后的特征图谱变化（绘图参考了Facebook团队的资料 (http://mlss.tuebingen.mpg.de/2015/slides/fergus/Fergus_1.pdf)）

图12-9给出了池化之后的“马赛克”类的图片，很显然，人类是不喜欢这样模糊图片的。但请注意，计算机的“视界”和人类完全不同，池化后的图片，丝毫不会影响它们对图片的特征提取。

这么说是有理论支撑的。这个理论就是局部线性变换的不变性（invariant）。它说的是，如果输入数据的局部进行了线性变换操作（如平移或旋转等），那么经过池化操作后，输出的结果并不会发生变化。局部平移“不变性”特别有用，尤其是我们关心某个特征是否出现，而不关心它出现的位置时。例如，在模式识别场景中，当我们检测人脸时，我们只关心图像中是否具备人脸的特征，而并不关心人脸是在图像的左上角和右下角。

因为池化综合了（过滤核范围内的）全部邻居的反馈，即通过k个像素的统计特性而不是单个像素来提取特征，自然这种方法能够大大提高神经网络的性能[9]。

12.5 勿忘全连接层

前面我们讲解了卷积层、激活层和池化层。但别忘了，在卷积神经网络的最后，还有一个至关重要的“全连接层（Fully Connected Layer，简称FC）”。“全连接”意味着，前层网络中的所有神经元都与下一层的所有神经元连接。全连接层设计目的在于，它将前面各个层学习到的“分布式特征表示”，映射到样本标记空间，然后利用损失函数来调控学习过程，最后给出对象的分类预测。

实际上，全连接层是就是传统的多层感知器（类似于我们在第八章学过的BP网络，不熟悉的读者可以前往查阅 (https://yq.aliyun.com/articles/110025)）。不同于BP全连接网络的是，卷积神经网络在输出层使用的激活函数不同，比如说它可能会使用Softmax函数。

这里，我们简单介绍一下这个Softmax函数。在数学上，Softmax函数又称归一化指数函数，它是逻辑函数的一种推广，其公式如（12-2）所示。

$$\sigma(\mathbf{z})_j = \frac{e^{z_j}}{\sum_{k=1}^{K} e^{z_k}} \quad \text{for } j = 1, \ldots, K. \tag{12-2}$$

我们常用SVM（支持向量机）来做分类器，SVM在分类的最后，会给一系列的标签如“猫”“狗”“船”等打一个具体分值，如[4, 1, -2]，而Softmax函数有所不同，它把这些分值实施规则化（regularization），也就是说，将这些实分值转换为一系列的概率值（信任度），如[0.95, 0.04, 0.0]，如图12-10所示。由此可见，其实SVM和Softmax是高度相互兼容的，不过是表现形式不同而已。

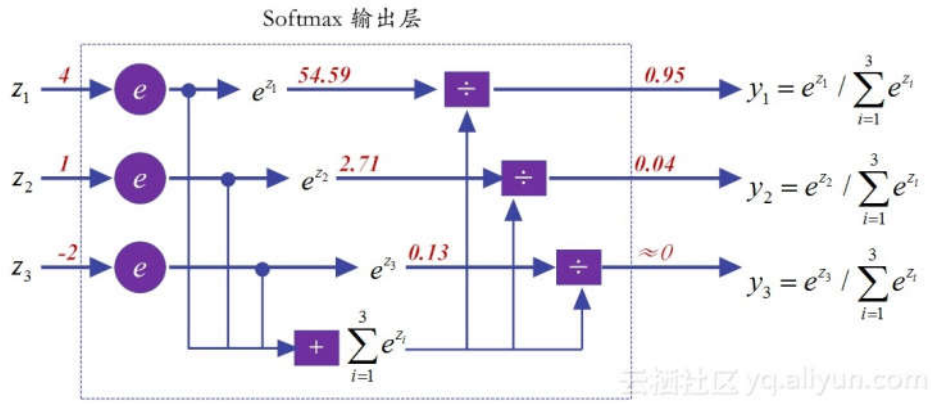



图12-10 Softmax输出层示意图（绘图参考了台湾大学李宏毅博士的工作 (http://speech.ee.ntu.edu.tw/~tlkagk/courses_MLSD15_2.html)）

虽然全连接层处于卷积神经网络最末的位置，看起来貌不惊人似的，但由于全连接层的参数冗余，导致该层的参数个数占据整个网络参数的绝大部分。这样一来，稍有不慎，全连接层就容易陷入过拟合的窘境，导致网络的泛化能力难尽人意。

12.7 小结与思考

到此为止，我们介绍完毕了卷积神经网络的所有核心层。各个层各司其职，概括起来，卷积层从数据中提取有用的特征；激活层为网络中引入非线性，增强网络表征能力；池化层通过采样减少特征维度，并保持这些特征具有某种程度上的尺度变化不变性。在全连接层实施对象的分类预测。

通过上面的学习，请你思考如下问题。

（1）由于全连接层因为参数个数太多，容易出现过拟合的现象，你知道Hinton教授的团队采取的是什么措施来弱化过拟合的吗？（提示：Dropout）