神经网络要点理解

emacsun

目录

第一次接触神经网络总是被其诸多的符号弄的眼花缭乱。几个重要的符号包括：

1. 样本的个数m;
2. 单个样本的feature个数n;
3. 神经网络的层数L;
4. 神经网络输出的类别数量K;

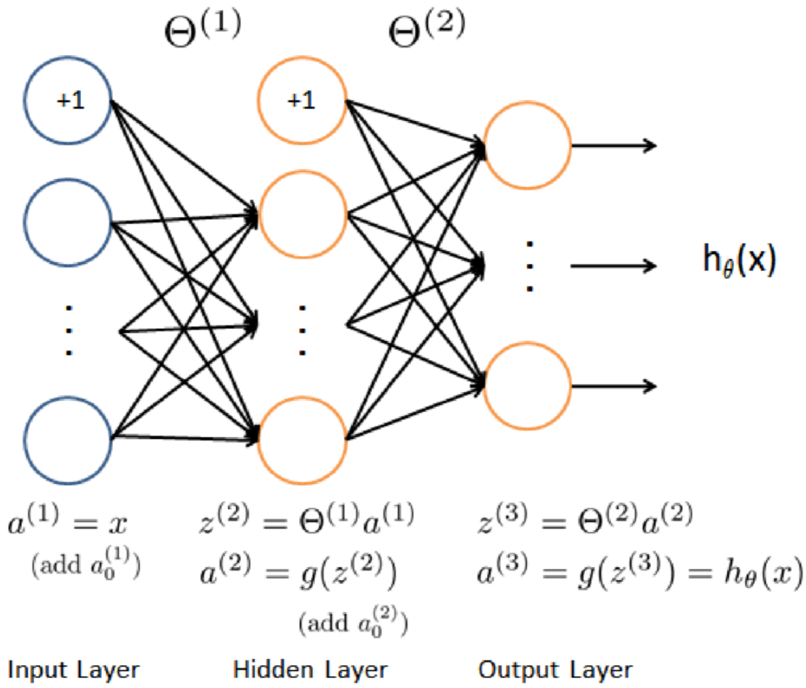
假设我们对5000幅20×20的手写数字灰度图像进行识别，则$m = 5000, n = 400, K = 10$。对于本文用到的神经网络，$L = 3$。

1 损失函数及其正则化

一个未经正则化的神经网络损失函数为：

$$J(\Theta) = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\sum_{k=1}^{K}\left[-y_k^{(i)}\log((h_\theta(x^{(i)}))_k) - (1 - y_k^{(i)})\log(1 - (h_\theta(x^{(i)}))_k)\right] \tag{1.1}$$

其中$h_\theta(x)$的计算如下：



此处$L = 3$.

针对上面的公式，我们有$x^{(i)}$表示第i个样本的矢量，这个矢量的大小是400×1。$h_\theta(x^{(i)})_k$表示第i个输入在第K个类上的输出。每一个输入样本$x^{(i)}$都会在神经网络的输出层产生K个输出，表示$x^{(i)}$属于这K个类中每个类的可能性。

当我们给定Θ_1，Θ_2时，我们可以根据上图来计算每一个$h_\theta(x^i)$，进而根据$J(\Theta)$的公式来计算损失函数。

注意在计算的过程中，我们遇到的一些矩阵(从上图到$J(\Theta)$的计算过程中遇到的矩阵)的维度为：

矩阵	维度
$a^{(1)}$	5000×401
$\Theta^{(1)}$	25×401
$z^{(2)}$	25×5000
$a^{(2)}$	26×5000
$\Theta^{(2)}$	10×26
$z^{(3)}$	10×5000
$a^{(3)}$	10×5000
Y	10×5000

其中$a^{(1)}$为添加了$a_0^{(1)}$后的矩阵；$a^{(2)}$为添加了$a_0^{(2)}$后的矩阵；Y为把1,2,...,10映射为矢量后的矩阵。

$J(\Theta)$计算的是5000个用户在10个类上的cost之和。所以式~(1.1)的方括号中如果是矩阵的话应该是一个10×5000的矩阵。

计算$J(\Theta)$的部分代码为：

```
a1 = [ones(m,1) X];
z2 = Theta1*a1';
a2 = 1./(1 + exp(-z2));
a2 = [ones(1,size(a2,2));a2];%add a_0^(2)
z3 = Theta2 * a2;

a3 = 1./(1 + exp(-z3));%10X5000

temp = eye(num_labels);
Y = temp(:,y);
J = (Y .* log(a3) + (1-Y).* log(1-a3))./m;
J = -1*sum(sum(J));
```

注意为了支持任何大于$K > 3$的分类，代码中不允许出现任何的magic number。比如：

```
temp = eye(num_labels);
```

就不能写成：

```
temp = eye(10);
```

虽然在这个例子中 `num_labels=10` magic number 也是不被允许的。

接下来是正则项的计算：

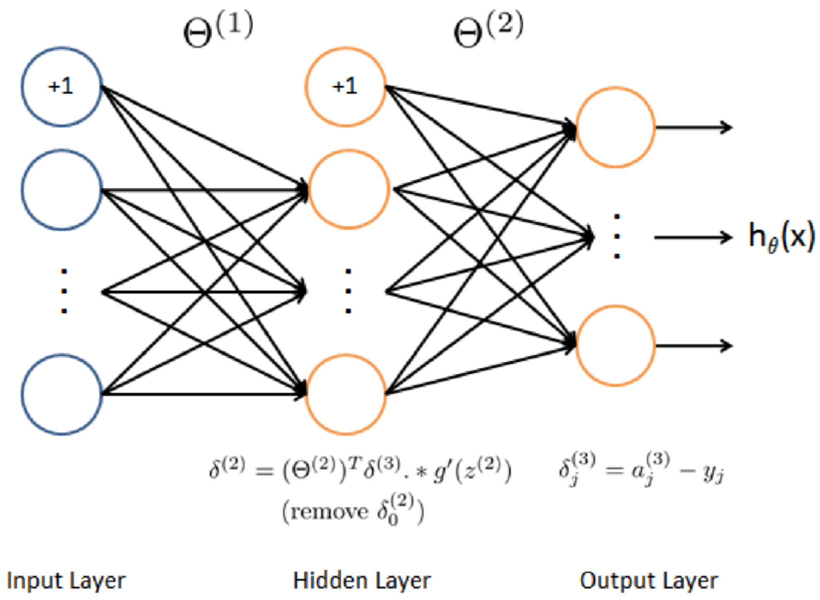
$$\frac{\lambda}{2m}\left[\sum_{j=1}^{25}\sum_{k=1}^{400}(\Theta_{j,k}^{(1)})^2 + \sum_{j=1}^{10}\sum_{k=1}^{25}(\Theta_{j,k}^{2})^2\right] \tag{1.2}$$

同样magic number是不被允许的。

2 后向传递算法

后向传递算法的步骤为：

1. 给定一个训练样本$x^{(t)}, y^{(t)}$ 首先计算前向过程，直到输出$h_\theta(x)$
2. 对每个层l的每个节点j，计算误差项$\delta_j^{(l)}$，这个误差项用来度量这个节点对输出负多大的“责任”；
3. 对于输出节点，我们直接计算网络的activation输出和真实的目标值之间的差即可。用这个差值作为$\delta_j^{(3)}$，对于隐藏的层，计算$\delta_j^{(l)}$时需要加权考虑层$l+1$上的错误。



根据上图，我们需要循环处理所有样本，一次处理一个，所以一定会有一个 `for t=1:m` 。在第t次迭代的时候处理第t个样本。循环内的步骤为：

1. 设定输入层的值为x^t，执行前向过程，计算$z^{(2)}, a^2, z^{(3)}, a^{(3)}$。注意在计算过程中需要为$a$添加一个bias项。
2. 对于层3中的每一个输出单元，设定$\delta_k^{(3)} = (a_k^{(3)} - y_k)$ 其中y_k是二进制数表示当前的训练样本是不是第k类，如果是，则$y_k = 1$；如果当前样本属于其他类则$y_k = 0$。

3. 对隐藏层$l=2$，设定：$\delta^{(2)}=(\Theta^{(2)})^T\delta^{(3)}.*g^{'}(z^{(2)})$

4. 从这个样本中累计梯度值。

$$\Delta^{(l)}=\Delta^{(l)}+\delta^{(l+1)}(a^{(l)})^T$$

   注意要去掉$\delta_0^{(2)}$

5. 获得梯度值：

$$\frac{\partial}{\partial\Theta_{ij}^{(l)}}J(\Theta)=D_{ij}^{(l)}=\frac{1}{m}\Delta_{ij}^{(l)}$$