Note for cs294A-note

(A.K.A Sparse Autoencoder)

iSea @ Jan. 12th, 2015

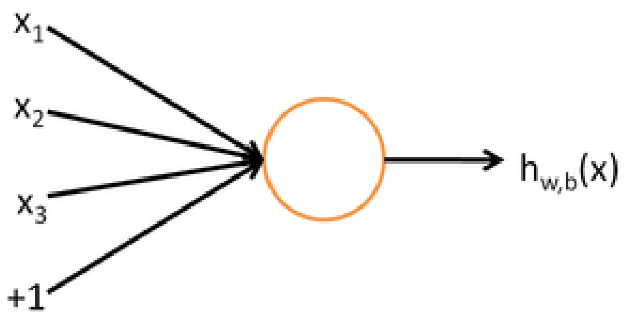
Content

1. 神经网络（Neural Network）
2. 反向传导算法（Backpropagation Algorithm）
3. 梯度检验与高级优化（Gradient checking and advanced optimization）
4. 自编码算法稀疏性（Autoencoder and sparsity）

---

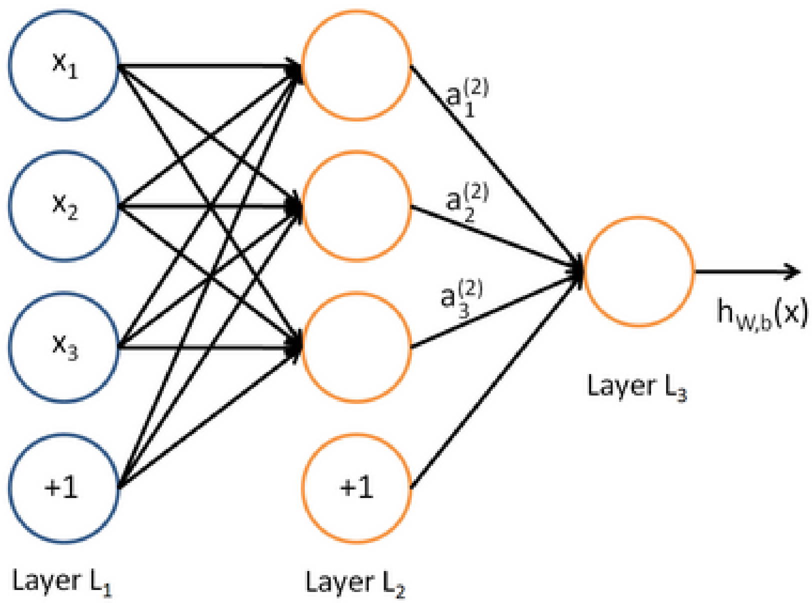
1 神经网络

一个神经元的结构：



其中的+1表示常数修正项，同Logistic Regression里面的x_0。可以发现，如果选择**激活函数**$f(\cdot)$为sigmoid函数$f(z) = 1/1 + exp(-z)$，那么一层的神经网络结构就是一个LR模型。

一个多层的神经网络：



第一层是**输入层（Input Layer）**，最后一层是**输出层（Output Layer）**，其他的层都是**隐藏层（Hidden Layer）**。

将参数记做$W_{ij}^{(l)}$，输出记做$a_i^{(l)}$，权重和记做$z_i^{(l)}$，有

$$
\begin{aligned}
z^{(l+1)} &= W^{(l)}a^{(l)} + b^{(l)} \\
a^{(l+1)} &= f(z^{(l+1)})
\end{aligned}
$$

神经网络可以有多个输出单元。

2 反向传导算法

类似于线性回归，定义神经网络的代价函数为方差代价函数：

$$J(W,b) = [\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(\frac{1}{2}\,||h_{W,b}(x^{(i)}) - y^{(i)}||^2)] + \frac{1}{\lambda}\sum_{l=1}^{nl-1}\sum_{i=1}^{sl}\sum_{j=1}^{sl+1}(W_{ji}^{(l)})^2$$

最后的项即使用MAP的regulation修正。

虽然这个函数是非凸的，直接使用梯度下降法来训练神经网络很容易陷入局部最优解，但实际上表现的很不错。**反向传导算法**是用来计算每层的偏导值：

1. 使用前面的两个式子做一次前向传递，算出所有层的激活值（activation）
2. 对输出层的每个输出单元，设

$$
\begin{aligned}
\delta_i^{(nl)} &= \frac{\partial}{\partial z_i^{(nl)}}\,\frac{1}{2}\,||y - h_{W,b}(x)||^2 \\
&= -(y_i - a_i^{(nl)}) \cdot f'(z_i^{(nl)})
\end{aligned}
$$

3. 对隐藏层的每个节点，设

$$\delta_i^{(l)} = (\sum_{j=1}^{sl+1} W_{ji}^{(l)}\delta_j^{(l+1)})f'(z_i^{(nl)})$$

4. 计算得到

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial W_{ij}^{(l)}} J(W,b;x,y) &= a_j^{(l)}\delta_i^{(l+1)} \\
\frac{\partial}{\partial b_i^{(l)}} J(W,b;x,y) &= \delta_i^{(l+1)}
\end{aligned}
$$

如果选用了sigmoid函数，这里的$f'(z_i^{(l)}) = a_i^{(l)}(1 - a_i^{(l)})$。

设置所有$W_{ij}^{(l)}, b_i^{(l)}$为$\mathrm{N}\left(0, \epsilon^2\right)$来使对称失效，然后一次batch梯度下降的迭代过程为：

1. 设置$\triangle W_{ij}^{(l)}, \triangle b_i^{(l)}$初始值为0
2. 对每个train set，使用前向传递算法计算出∂并叠加到$\triangle W_{ij}^{(l)}, \triangle b_i^{(l)}$

3. 更新参数：

$$W^{(l)} := W^{(l)} - \alpha[(\frac{1}{m}\triangle W^{(l)}) + \lambda W^{(l)}]$$
$$b^{(l)} := b^{(l)} - \alpha[\frac{1}{m}\triangle b^{(l)}]$$

3 梯度检验和高级优化

后向传播算法是个很难调试的方法，很多时候一些错误的实现方法也能得到正确的结果。这里介绍一种梯度检验方法来测试保证代码实现的正确性。

根据导数的定义：

$$\frac{J(\theta + EPS) - J(\theta - EPS)}{2 \times EPS}$$

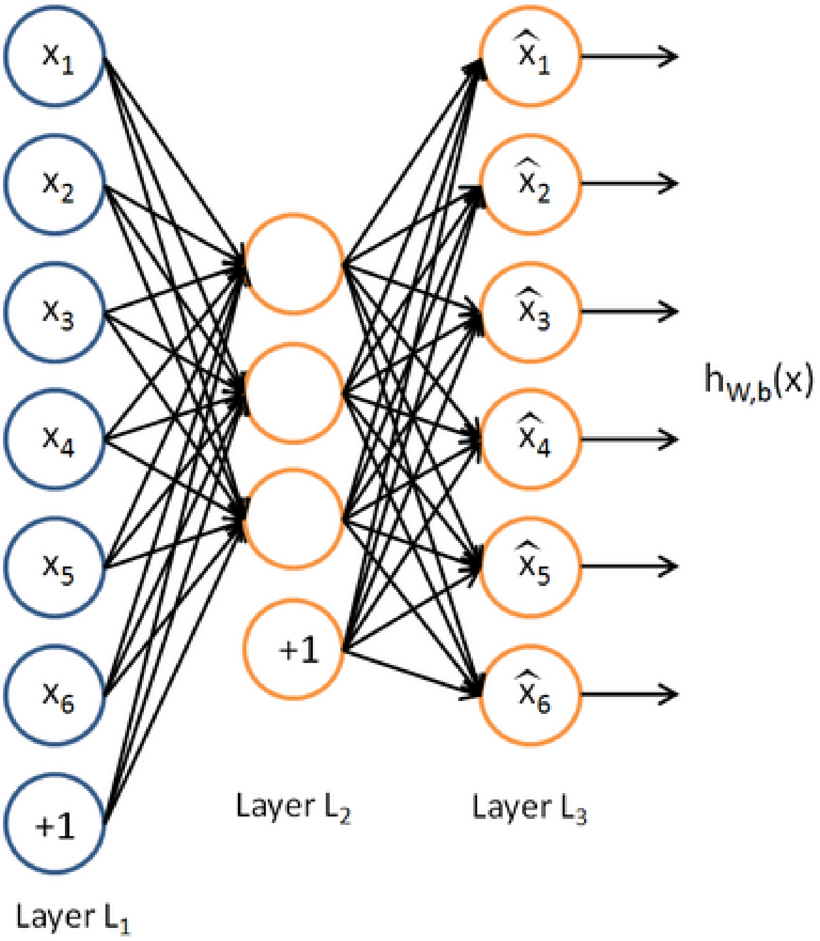
对于每个参数，保持其他参数不变，计算得到偏导值，然后与实现得到的值比较的过程就是**梯度检验**。在后向传播中，具体实现即前向传递两次计算出参数的偏导值，然后与$(\frac{1}{m}\triangle W^{(l)}) + \lambda W^{(l)}$或$\frac{1}{m}\triangle b^{(l)}$比较做检验。

除了梯度下降法之外，最小化$J(\theta)$还有很多其他优化方法。比如自动调整学习速率来用一个合适的步长更快的迭代至最优解，还有类似于牛顿法，近似出Hessian矩阵来“急速”的收敛到最优解。关于这些的详细讨论有些超出了范畴，可以了解的有**L-BFGS算法**和**共轭梯度**。

4 自编码算法与稀疏性

不同于前面的神经网络，自编码算法是一种无监督学习，只需要接受一些输入，来学习获取一些信息。一个示意图：

自编码算法试图学习$h_{W,b}(x) \approx x$，在图中即$\hat{x} \approx x$。学习的目的是什么呢？当隐藏层单元个数少于输入层单元时，通过更少的隐藏层信息，可以重构出输出层。这就是一种压缩算法，如果输出完全随机，这个压缩自然是很困难的。但是大部分时候信息有一些隐藏的关系，这个方法则可以发现一些这些隐藏关系。



这个想法是建立在隐藏层单元个数较少的前提上的，然而当这个个数较大时，仍然可以通过一些对网络的限制来发现一些有趣的结构。这里我们在隐藏层上增加一个**稀疏性**的限制，限制大部分神经元的输出值在大部分时候接近0。定义

$$\hat{\rho}_j = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}[a_j^{(2)}(x^{(i)})]$$

将隐藏层的第j个神经元输出的平均值表示为它的稀疏性，通常这个数很小（比如0.05）。这时为代价函数中加入一个惩罚因子：

$$J_{sparse}(W,b) = J(W,b) + \beta\sum_{i=1}^{s2}(\rho\log\frac{\rho}{\hat{\rho}} + (1-\rho)\log\frac{1-\rho}{1-\hat{\rho}})$$

具体到实现步骤中，就是将计算隐藏层的δ替换为：

$$\delta_i^{(l)} = (\sum_{j=1}^{sl+1} W_{ji}^{(l)}\delta_j^{(l+1)} + \beta(-\frac{\rho}{\hat{\rho}_i} + \frac{1-\rho}{1-\hat{\rho}_i}))f'(z_i^{(nl)})$$

可以用梯度验证来验证公式是否正确。

Reference

[1] http://deeplearning.stanford.edu/wiki/index.php/UFLDL_Tutorial
[2] http://nlp.stanford.edu/~socherr/sparseAutoencoder_2011new.pdf