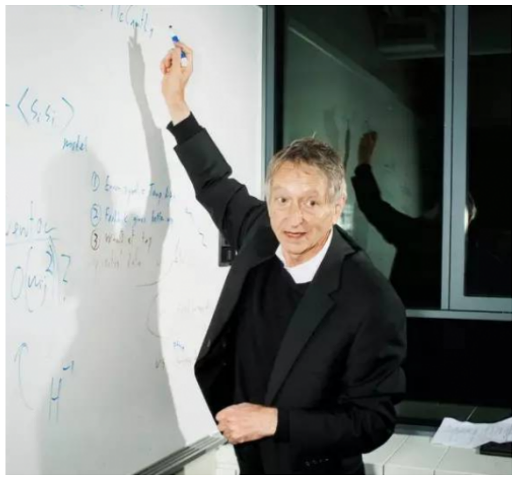
揭开迷雾，来一顿美味的Capsule盛宴

23 Jan

By 苏剑林 | 2018-01-23 | 135570位读者 引用



Geoffrey Hinton在谷歌多伦多办公室

由深度学习先驱Hinton开源的Capsule论文《Dynamic Routing Between Capsules》，无疑是去年深度学习界最热点的消息之一。得益于各种媒体的各种吹捧，Capsule被冠以了各种神秘的色彩，诸如“抛弃了梯度下降”、“推倒深度学习重来”等字眼层出不穷，但也有人觉得Capsule不外乎是一个新的炒作概念。

本文试图揭开让人迷惘的云雾，领悟Capsule背后的原理和魅力，品尝这一顿Capsule盛宴。同时，笔者补做了一个自己设计的实验，这个实验能比原论文的实验更有力说明Capsule的确产生效果了。

菜谱一览：

1、Capsule是什么？

2、Capsule为什么要这样做？

3、Capsule真的好吗？

4、我觉得Capsule怎样？

5、若干小菜。

前言

Capsule的论文已经放出几个月了，网上已经有很多大佬进行解读，也有大佬开源实现了CapsuleNet，这些内容都加速了我对Capsule的理解。然而，我觉得美中不足的是，网上多数的解读，都只是在论文的翻译上粉饰了一点文字，并没有对Capsule的原理进行解读。**比如“动态路由”那部分，基本上就是照搬论文的算法，然后说一下迭代3次就收敛了。但收敛出什么来？论文没有说，解读也没有说，这显然是不能让人满意的。**也难怪知乎上有读者评论说：

> 所谓的capsule为dl又贡献了一个花里胡哨的trick概念。说它是trick，因为hinton没有说为什么routing算法为什么需要那么几步，循环套着循环，有什么理论依据吗？还是就是凑出来的？

这个评论也许过激了，然而也是很中肯的：凭啥Hinton摆出来一套算法又不解释，我们就要稀里糊涂的跟着玩？

Capsule盛宴

宴会特色

这次Capsule盛宴的特色是“vector in vector out”，取代了以往的“scaler in scaler out”，也就是神经元的输入输出都变成了向量，从而算是对神经网络理论的一次革命。然而真的是这样子吗？难道我们以往就没有做过“vector in vector out”的任务了吗？有，而且多的是！NLP中，一个词向量序列的输入，不就可以看成“vector in”了吗？这个词向量序列经过RNN/CNN/Attention的编码，输出一个新序列，不就是“vector out”了吗？在目前的深度学习中，从来不缺乏“vector in vector out”的案例，因此显然这不能算是Capsule的革命。

Capsule的革命在于：**它提出了一种新的“vector in vector out”的传递方案，并且这种方案在很大程度上是可解释的。**

如果问深度学习（神经网络）为什么有效，我一般会这样回答：神经网络通过层层叠加完成了对输入的层层抽象，这个过程某种程度上模拟了人的层次分类做法，从而完成对最终目标的输出，并且具有比较好的泛化能力。的确，神经网络应该是这样做的，然而它并不能告诉我们它确确实实是这样做的，这就是神经网络的难解释性，也就是很多人会将深度学习视为黑箱的原因之一。

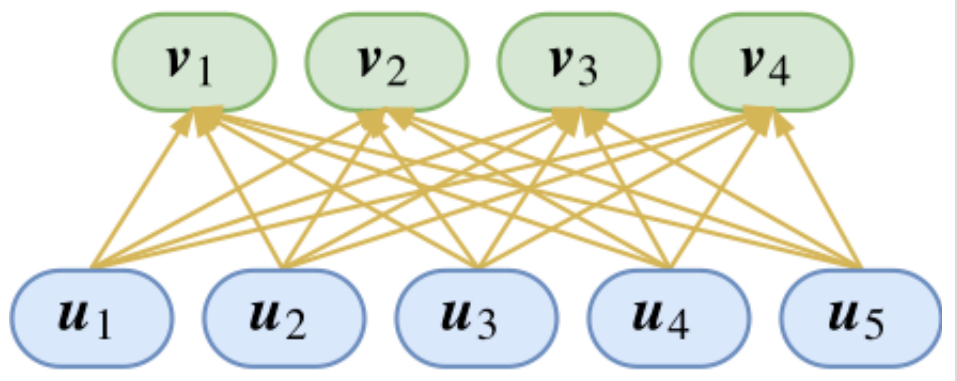
让我们来看Hinton是怎么来通过Capsule突破这一点的。

大盆菜

如果要用一道菜来比喻Capsule，我想到了“大盆菜”：

> 盆菜作为客家菜的菜式出现由来以久，一般也称为大盘菜，大盘菜源于客家人传统的“发财大盘菜”，顾名思义就是用一个大大的盘子，将食物都放到里面，融汇出一种特有滋味。丰富的材料一层层叠进大盘之中，最易吸收肴汁的材料通常放在下面。吃的时候每桌一盘，一层一层吃下去，汁液交融，味道馥郁而香浓，令人大有渐入佳景之快。

Capsule就是针对着这个“层层递进”的目标来设计的，但坦白说，Capsule论文的文笔真的不敢恭维，因此本文尽量不与论文中的符号相同，以免读者再次云里雾里。让我们来看个图。

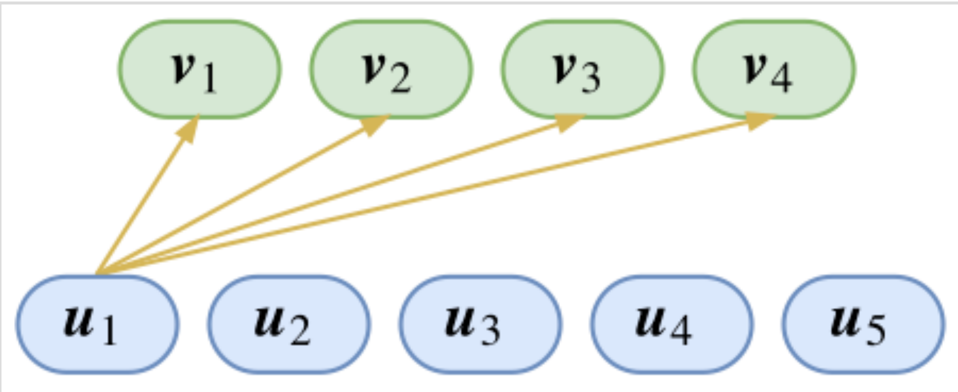


capsule示意图

如图所示，底层的胶囊和高层的胶囊构成一些连接关系。等等，什么是“胶囊”？其实，只要把一个向量当作一个整体来看，它就是一个“胶囊”，是的，你没看错，你可以这样理解：神经元就是标量，胶囊就是向量，就这么粗暴！Hinton的理解是：每一个胶囊表示一个属性，而胶囊的向量则表示这个属性的“标架”。也就是说，我们以前只是用一个标量表示有没有这个特征（比如有没有羽毛），现在我们用一个向量来表示，不仅仅表示有没有，还表示“有什么样的”（比如有什么颜色、什么纹理的羽毛），如果这样理解，就是说在对单个特征的表达上更丰富了。

说到这里，我感觉有点像NLP中的词向量，以前我们只是用one hot来表示一个词，也就是表示有没有这个词而已。现在我们用词向量来表示一个词，显然词向量表达的特征更丰富，不仅可以表示有没有，还可以表示哪些词有相近含义。词向量就是NLP中的“胶囊”？这个类比可能有点牵强，但我觉得意思已经对了。

那么，这些胶囊要怎么运算，才能体现出“层层抽象”、“层层分类”的特性呢？让我们先看其中一部分连接：



先留心观察capsule的一部分连接

图上只展示了$\boldsymbol{u}_1$ $\boldsymbol{u}_1$的连接。这也就是说，目前已经有了$\boldsymbol{u}_1$ $\boldsymbol{u}_1$这个特征（假设是羽毛），那么我想知道它属于上层特征$\boldsymbol{v}_1,\boldsymbol{v}_2,\boldsymbol{v}_3,\boldsymbol{v}_4$ $\boldsymbol{v}_1,\boldsymbol{v}_2,\boldsymbol{v}_3,\boldsymbol{v}_4$（假设分别代表了鸡、鸭、鱼、狗）中的哪一个。分类问题我们显然已经是很熟悉了，不就是内积后softmax吗？于是单靠$\boldsymbol{u}_1$ $\boldsymbol{u}_1$这个特征，我们推导出它是属于鸡、鸭、鱼、狗的概率分别是

$$\big(p_{1|1},p_{2|1},p_{3|1},p_{4|1}\big)=\frac{1}{Z_1}\Big(e^{\langle\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{v}_1\rangle},e^{\langle\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{v}_2\rangle},e^{\langle\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{v}_3\rangle},e^{\langle\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{v}_4\rangle}\Big)\tag{1}$$

$$\big(p_{1|1},p_{2|1},p_{3|1},p_{4|1}\big)=\frac{1}{Z_1}\Big(e^{\langle\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{v}_1\rangle},e^{\langle\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{v}_2\rangle},e^{\langle\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{v}_3\rangle},e^{\langle\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{v}_4\rangle}\Big)$$

我们当然期望$p_{1|1}$ $p_{1|1}$和$p_{2|1}$ $p_{2|1}$会明显大于$p_{3|1}$ $p_{3|1}$和$p_{4|1}$ $p_{4|1}$。不过，单靠这个特征还不够，我们还需要综合各个特征，于是可以把上述操作对各个$\boldsymbol{u}_i$ $\boldsymbol{u}_i$都做一遍，继而得到$\big(p_{1|2},p_{2|2},p_{3|2},p_{4|2}\big)$ $\big(p_{1|2},p_{2|2},p_{3|2},p_{4|2}\big)$、$\big(p_{1|3},p_{2|3},p_{3|3},p_{4|3}\big)$ $\big(p_{1|3},p_{2|3},p_{3|3},p_{4|3}\big)$、…

问题是，现在得到这么多预测结果，那我究竟要选择哪个呢？而且我又不是真的要做分类，我要的是融合这些特征，构成更高级的特征。于是Hinton认为，既然$\boldsymbol{u}_i$ $\boldsymbol{u}_i$这个特征得到的概率分布是$\big(p_{1|i},p_{2|i},p_{3|i},p_{4|i}\big)$ $\big(p_{1|i},p_{2|i},p_{3|i},p_{4|i}\big)$，那么我把这个特征切成四份，分别为$\big(p_{1|i}\boldsymbol{u}_i,p_{2|i}\boldsymbol{u}_i,p_{3|i}\boldsymbol{u}_i,p_{4|i}\boldsymbol{u}_i\big)$ $\big(p_{1|i}\boldsymbol{u}_i,p_{2|i}\boldsymbol{u}_i,p_{3|i}\boldsymbol{u}_i,p_{4|i}\boldsymbol{u}_i\big)$，然后把这几个特征分别传给$\boldsymbol{v}_1,\boldsymbol{v}_2,\boldsymbol{v}_3,\boldsymbol{v}_4$ $\boldsymbol{v}_1,\boldsymbol{v}_2,\boldsymbol{v}_3,\boldsymbol{v}_4$，最后$\boldsymbol{v}_1,\boldsymbol{v}_2,\boldsymbol{v}_3,\boldsymbol{v}_4$ $\boldsymbol{v}_1,\boldsymbol{v}_2,\boldsymbol{v}_3,\boldsymbol{v}_4$其实就是各个底层传入的特征的累加，这样不就好了？

$$\boldsymbol{v}_j = squash\left(\sum_i p_{j|i}\boldsymbol{u}_i\right) = squash\left(\sum_i \frac{e^{\langle \boldsymbol{u}_i, \boldsymbol{v}_j\rangle}}{Z_i}\boldsymbol{u}_i\right) \tag{2}$$

$$\boldsymbol{v}_j = squash\left(\sum_i p_{j|i}\boldsymbol{u}_i\right) = squash\left(\sum_i \frac{e^{\langle \boldsymbol{u}_i, \boldsymbol{v}_j\rangle}}{Z_i}\boldsymbol{u}_i\right)$$

从上往下看，那么Capsule就是每个底层特征分别做分类，然后将分类结果整合。这时$\boldsymbol{v}_j$应该尽量与所有$\boldsymbol{u}_i$都比较靠近，靠近的度量是内积。因此，从下往上看的话，可以认为$\boldsymbol{v}_j$实际上就是各个$\boldsymbol{u}_i$的某个聚类中心，而**Capsule的核心思想就是输出是输入的某种聚类结果**。

现在来看这个$squash$是什么玩意，它怎么来的呢？

浓缩果汁

squash在英文中也有浓缩果汁之意，我们就当它是一杯果汁品尝吧。这杯果汁的出现，是因为Hinton希望Capsule能有的一个性质是：胶囊的模长能够代表这个特征的概率。

其实我不喜欢概率这个名词，因为概率让我们联想到归一化，而归一化事实上是一件很麻烦的事情。我觉得可以称为是特征的“显著程度”，这就好解释了，模长越大，这个特征越显著。而我们又希望有一个有界的指标来对这个“显著程度”进行衡量，所以就只能对这个模长进行压缩了，所谓“浓缩就是精华”嘛。Hinton选取的压缩方案是：

$$squash(\boldsymbol{x}) = \frac{\Vert\boldsymbol{x}\Vert^2}{1+\Vert\boldsymbol{x}\Vert^2}\frac{\boldsymbol{x}}{\Vert\boldsymbol{x}\Vert} \tag{3}$$

$$squash(\boldsymbol{x}) = \frac{\Vert\boldsymbol{x}\Vert^2}{1+\Vert\boldsymbol{x}\Vert^2}\frac{\boldsymbol{x}}{\Vert\boldsymbol{x}\Vert}$$

其中$\boldsymbol{x}/\Vert\boldsymbol{x}\Vert$是很好理解的，就是将模长变为1，那么前半部分怎么理解呢？为什么这样选择？事实上，将模长压缩到0～1的方案有很多，比如

$$\tanh \Vert\boldsymbol{x}\Vert,\quad 1-e^{-\Vert\boldsymbol{x}\Vert},\quad \frac{\Vert\boldsymbol{x}\Vert}{1+\Vert\boldsymbol{x}\Vert}$$

$$\tanh \Vert\boldsymbol{x}\Vert,\quad 1-e^{-\Vert\boldsymbol{x}\Vert},\quad \frac{\Vert\boldsymbol{x}\Vert}{1+\Vert\boldsymbol{x}\Vert}$$

等等，并不确定Hinton选择目前这个方案的思路。也许可以每个方案都探索一下？事实上，我在一些实验中发现，选择

$$squash(\boldsymbol{x}) = \frac{\Vert\boldsymbol{x}\Vert^2}{0.5+\Vert\boldsymbol{x}\Vert^2}\frac{\boldsymbol{x}}{\Vert\boldsymbol{x}\Vert}$$

$$squash(\boldsymbol{x})=\frac{\Vert\boldsymbol{x}\Vert^2}{0.5+\Vert\boldsymbol{x}\Vert^2}\frac{\boldsymbol{x}}{\Vert\boldsymbol{x}\Vert}$$

效果要好一点。这个函数的特点是在模长很接近于0时起到放大作用，而不像原来的函数那样全局都压缩。

然而，一个值得思考的问题是：如果在中间层，那么这个压缩处理是不是必要的呢？因为已经有了后面说的动态路由在里边，因此即使去掉$squash$函数，网络也已经具有了非线性了，因此直觉上并没有必要在中间层也引入特征压缩，正如普通神经网络也不一定要用sigmoid函数压缩到0～1。我觉得这个要在实践中好好检验一下。

动态路由

注意到(2)式，为了求$\boldsymbol{v}_j$需要求softmax，可是为了求softmax又需要知道$\boldsymbol{v}_j$，这不是个鸡生蛋、蛋生鸡的问题了吗？这时候就要上“主菜”了，即“动态路由”（Dynamic Routing），它能够根据自身的特性来更新（部分）参数，从而初步达到了Hinton的放弃梯度下降的目标。

这道“主菜”究竟是不是这样的呢？它是怎么想出来的？最终收敛到哪里去？让我们先上两道小菜，然后再慢慢来品尝这道主菜。

小菜1

让我们先回到普通的神经网络，大家知道，激活函数在神经网络中的地位是举足轻重的。当然，激活函数本身很简单，比如一个tanh激活的全连接层，用tensorflow写起来就是：

```
y = tf.matmul(W, x) + b
y = tf.tanh(y)
```

可是，如果我想用$x=y+\cos y$的反函数来激活呢？也就是说，你得给我解出$y=f(x)$，然后再用它来做激活函数。

然而数学家告诉我们，这个东西的反函数是一个超越函数，也就是不可能用初等函数有限地表示出来。那这样不就是故意刁难么？不要紧，我们有迭代：

$$y_{n+1}=x-\cos y_n$$

选择$y_0=x$，代入上式迭代几次，基本上就可以得到比较准确的y了。假如迭代三次，那就是

$$y=x-\cos\big(x-\cos(x-\cos x)\big)$$

用tensorflow写出来就是

```
y = tf.matmul(W, x) + b
Y = y
for i in range(3):
    Y = y - tf.cos(Y)
```

如果读者已经“预习”过Capsule，那么就会发现这跟Capsule的动态路由很像。

小菜2

再来看一个例子，这个例子可能在NLP中有很多对应的情景，但图像领域其实也不少。考虑一个向量序列$(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\dots,\boldsymbol{x}_n)$，我现在要想办法将这$n$个向量整合成一个向量$\boldsymbol{x}$（encoder），然后用这个向量来做分类。

也许读者会想到用LSTM。但我这里仅仅想要将它表示为原来向量的线性组合，也就是：

$$\boldsymbol{x}=\sum_{i=1}^{n}\lambda_i \boldsymbol{x}_i$$

$$\boldsymbol{x}=\sum_{i=1}^{n}\lambda_i \boldsymbol{x}_i$$

这里的λ_i相当于衡量了$\boldsymbol{x}$与$\boldsymbol{x}_i$的相似度。然而问题来了，在$\boldsymbol{x}$出现之前，凭什么能够确定这个相似度呢？这不也是一个鸡生蛋、蛋生鸡的问题吗？解决这个问题的一个方案也是迭代。首先我们也可以定义一个基于softmax的相似度指标，然后让

$$\boldsymbol{x}=\sum_{i=1}^{n}\frac{e^{\langle\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}_i\rangle}}{Z}\boldsymbol{x}_i$$

$$\boldsymbol{x}=\sum_{i=1}^{n}\frac{e^{\langle\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}_i\rangle}}{Z}\boldsymbol{x}_i$$

一开始，我们一无所知，所以只好取$\boldsymbol{x}$为各个$\boldsymbol{x}_i$的均值，然后代入右边就可以算出一个$\boldsymbol{x}$，再把它代入右边，反复迭代就行，一般迭代有限次就可以收敛，于是就可以将这个迭代过程嵌入到神经网络中了。

如果说小菜1跟动态路由只是神似，那么小菜2已经跟动态路由是神似＋形似了。不过我并没有看到已有的工作是这样做的，这个小菜只是我的头脑风暴。

上主菜～

其实有了这两个小菜，动态路由这道主菜根本就不神秘了。**为了得到各个$\boldsymbol{v}_j$，一开始先让它们全都等于$\boldsymbol{u}_i$的均值，然后反复迭代就好。说白了，输出是输入的聚类结果，而聚类通常都需要迭代算法，这个迭代算法就**

称为“动态路由”。至于这个动态路由的细节，其实是不固定的，取决于聚类的算法，比如关于Capsule的新文章《MATRIX CAPSULES WITH EM ROUTING》就使用了Gaussian Mixture Model来聚类。

理解到这里，就可以写出本文的动态路由的算法了：

> 动态路由算法
>
> 初始化$b_{ij}=0$
>
> 迭代r次：
>
> $\boldsymbol{c}_i \leftarrow softmax(\boldsymbol{b}_i)$；
>
> $\boldsymbol{s}_j \leftarrow \sum_i c_{ij}\boldsymbol{u}_i$；
>
> $\boldsymbol{v}_j \leftarrow squash(\boldsymbol{s}_j)$；
>
> $b_{ij} \leftarrow \langle \boldsymbol{u}_i, \boldsymbol{v}_j\rangle$。
>
> 返回$\boldsymbol{v}_j$。

这里的c_{ij}就是前文的$p_{j|i}$。

“嘿，终于逮到个错误了，我看过论文，应该是$b_{ij} \leftarrow b_{ij} + \langle \boldsymbol{u}_i, \boldsymbol{v}_j\rangle$而不是$b_{ij} \leftarrow \langle \boldsymbol{u}_i, \boldsymbol{v}_j\rangle$吧？”

事实上，上述算法并没有错——如果你承认本文的推导过程、承认(2)式的话，那么上述迭代过程就是没有错的。

“难道是Hinton错了？就凭你也有资格向Hinton叫板？”别急别急，先让我慢慢分析Hinton的迭代出现了什么问题。假如按照Hinton的算法，那么是$b_{ij} \leftarrow b_{ij} + \langle \boldsymbol{u}_i, \boldsymbol{v}_j\rangle$，从而经过$r$次迭代后，就变成了：

$$\boldsymbol{v}_j^{(r)} = squash\left(\sum_i \frac{e^{\left\langle \boldsymbol{u}_i,\, \boldsymbol{v}_j^{(0)}+\boldsymbol{v}_j^{(1)}+\dots+\boldsymbol{v}_j^{(r-1)}\right\rangle}}{Z_i}\boldsymbol{u}_i\right)$$

$$\boldsymbol{v}_j^{(r)} = squash\left(\sum_i \frac{e^{\left\langle \boldsymbol{u}_i,\, \boldsymbol{v}_j^{(0)}+\boldsymbol{v}_j^{(1)}+\dots+\boldsymbol{v}_j^{(r-1)}\right\rangle}}{Z_i}\boldsymbol{u}_i\right)$$

由于$\boldsymbol{v}_j^{(r)}$会越来越接近真实的$\boldsymbol{v}_j$，那么我们可以写出

$$\boldsymbol{v}_j^{(r)} \sim squash\left(\sum_i \frac{e^{r\langle \boldsymbol{u}_i,\, \boldsymbol{v}_j\rangle}}{Z_i}\boldsymbol{u}_i\right)$$

$$v_j^{(r)} \sim squash\left(\sum_i \frac{e^{r\langle \boldsymbol{u}_i, \boldsymbol{v}_j\rangle}}{Z_i}\boldsymbol{u}_i\right)$$

假如经过无穷多次迭代（实际上算力有限，做不到，但理论上总可以做到的），**那么$r \to \infty$$r \to \infty$，这样的话softmax的结果是非零即1，也就是说，每个底层的胶囊仅仅联系到唯一一个上层胶囊。**

这合理吗？我觉得不合理。不同的类别之间是有可能有共同的特征的，这就好比猫和狗虽然不一样，但是都有差不多的眼睛。对于这个问题，有些朋友是这样解释的：$r$$r$是一个超参数，不能太大，太大了就容易过拟合。首先我不知道Hinton是不是也是同样的想法，但我认为，如果认为$r$$r$是一个超参，那么这将会使得Capsule太丑陋了！

是啊，动态路由被来已经被很多读者评价为“不知所云”了，如果加上完全不符合直觉的超参，不就更加难看了吗？相反，如果换成本文的(2)(2)式作为出发点，然后得到本文的动态路由算法，才能符合聚类的思想，而且在理论上会好看些，因为这时候就是$r$$r$越大越好了（看算力而定），不存在这个超参。事实上，我改动了之后，在目前开源的Capsule源码上跑，也能跑到同样的结果。

至于读者怎么选择，就看读者的意愿吧。我自己是有点强迫症的，忍受不了理论上的不足。

模型细节

下面介绍Capsule实现的细节，对应的代码在**我的Github**中，不过目前只有Keras版。相比之前实现的版本，我的版本是纯Keras实现的(原来是半Keras半tensorflow)，并通过`K.local_conv1d`函数替代了原作者使用的`K.map_fn`提升了好几倍的速度，这是因为`K.map_fn`并不会自动并行，要并行的话需要想办法整合到一个矩阵运算；其次我通过`K.conv1d`实现了共享参数版的。代码运行环境是Python2.7 + tensorflow 1.8 + keras 2.1.4。

全连接版

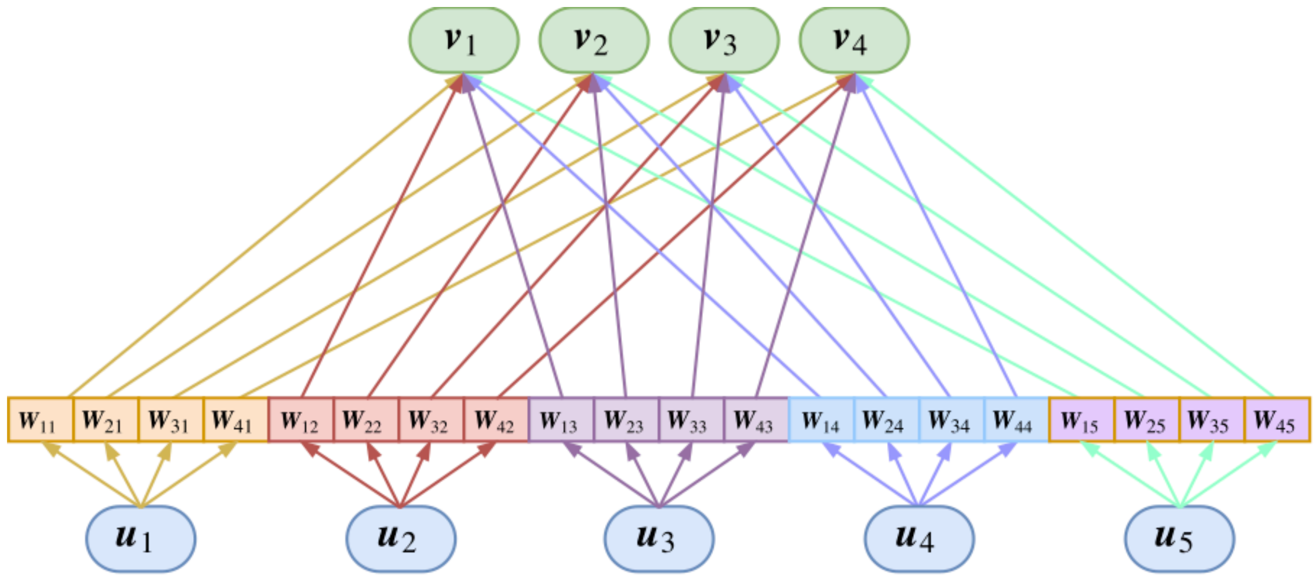
先不管是Hinton版还是我的版本，按照这个动态路由的算法，$\boldsymbol{v}_j$ $\boldsymbol{v}_j$能够迭代地算出来，那不就没有参数了吗？真的抛弃了反向传播了？

非也非也～如果真的这样的话，各个$\boldsymbol{v}_j$ $\boldsymbol{v}_j$都一样了。前面已经说了，$\boldsymbol{v}_j$ $\boldsymbol{v}_j$是作为输入$\boldsymbol{u}_i$ $\boldsymbol{u}_i$的某种聚类中心出现的，而从不同角度看输入，得到的聚类结果显然是不一样的。那么为了实现“多角度看特征”，于是可以在每个胶囊传入下一个胶囊之前，都要先乘上一个矩阵做变换，所以(2)(2)式实际上应该要变为

$$\boldsymbol{v}_j = squash\left(\sum_i \frac{e^{\langle \hat{\boldsymbol{u}}_{j|i}, \boldsymbol{v}_j\rangle}}{Z_i}\hat{\boldsymbol{u}}_{j|i}\right),\quad \hat{\boldsymbol{u}}_{j|i} = \boldsymbol{W}_{ji}\boldsymbol{u}_i \tag{4}$$

$$\boldsymbol{v}_j = squash\left(\sum_i \frac{e^{\langle \hat{\boldsymbol{u}}_{j|i}, \boldsymbol{v}_j\rangle}}{Z_i}\hat{\boldsymbol{u}}_{j|i}\right),\quad \hat{\boldsymbol{u}}_{j|i} = \boldsymbol{W}_{ji}\boldsymbol{u}_i$$

这里的$\boldsymbol{W}_{ji}$ $\boldsymbol{W}_{ji}$是待训练的矩阵，这里的乘法是矩阵乘法，也就是矩阵乘以向量。所以，Capsule变成了下图



全连接版的capsule图示

这时候就可以得到完整动态路由了

动态路由算法

初始化$b_{ij} = 0$ $b_{ij} = 0$

迭代r r次：

$\boldsymbol{c}_i \leftarrow softmax(\boldsymbol{b}_i)$ $\boldsymbol{c}_i \leftarrow softmax(\boldsymbol{b}_i)$;

$\boldsymbol{s}_j \leftarrow \sum_i c_{ij}\hat{\boldsymbol{u}}_{j|i}$ $\boldsymbol{s}_j \leftarrow \sum_i c_{ij}\hat{\boldsymbol{u}}_{j|i}$;

$\boldsymbol{v}_j \leftarrow squash(\boldsymbol{s}_j)$ $\boldsymbol{v}_j \leftarrow squash(\boldsymbol{s}_j)$;

$b_{ij} \leftarrow \langle \hat{\boldsymbol{u}}_{j|i}, \boldsymbol{v}_j \rangle$ $b_{ij} \leftarrow \langle \hat{\boldsymbol{u}}_{j|i}, \boldsymbol{v}_j \rangle$。

返回$\boldsymbol{v}_j$ $\boldsymbol{v}_j$。

这样的Capsule层，显然相当于普通神经网络中的全连接层。

共享版

众所周知，全连接层只能处理定长输入，全连接版的Capsule也不例外。而CNN处理的图像大小通常是不定的，提取的特征数目就不定了，这种情形下，全连接层的Capsule就不适用了。因为在前一图就可以看到，参数**矩阵的个数等于输入输入胶囊数目乘以输出胶囊数目，既然输入数目不固定，那么就不能用全连接了。**

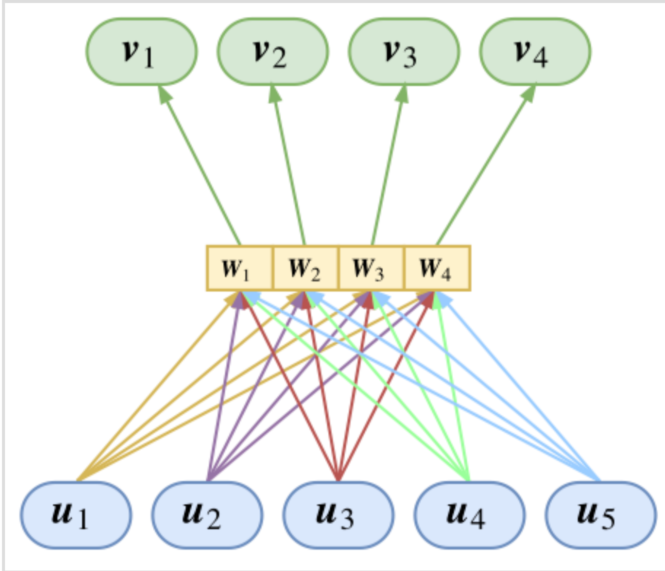
所以跟CNN的权值共享一样，我们也需要一个权值共享版的Capsule。所谓共享版，是指对于固定的上层胶囊j j，它与所有的底层胶囊的连接的变换矩阵是共用的，即$\boldsymbol{W}_{ji} \equiv \boldsymbol{W}_j$ $\boldsymbol{W}_{ji} \equiv \boldsymbol{W}_j$。

如图所示，共享版其实不难理解，就是**自下而上地看，就是所有输入向量经过同一个矩阵进行映射后，完成聚类进行输出，将这个过程重复几次，就输出几个向量（胶囊）；又或者自上而下地看，将每个变换矩阵看成是上层胶囊的识别器，上层胶囊通过这个矩阵来识别出底层胶囊是不是有这个特征。**因此很明显，这个版本的胶

囊的参数量并不依赖于输入的胶囊个数，因此可以轻松接在CNN后面。对于共享版，(2)(2)式要变为

$$\boldsymbol{v}_j = squash\left(\sum_i \frac{e^{\langle \hat{\boldsymbol{u}}_{j|i},\boldsymbol{v}_j\rangle}}{Z_i}\hat{\boldsymbol{u}}_{j|i}\right),\quad \hat{\boldsymbol{u}}_{j|i} = \boldsymbol{W}_j\boldsymbol{u}_i \tag{5}$$

$$\boldsymbol{v}_j = squash\left(\sum_i \frac{e^{\langle \hat{\boldsymbol{u}}_{j|i},\boldsymbol{v}_j\rangle}}{Z_i}\hat{\boldsymbol{u}}_{j|i}\right),\quad \hat{\boldsymbol{u}}_{j|i} = \boldsymbol{W}_j\boldsymbol{u}_i$$



参数共享版capsule

至于动态路由算法就没有改变了。

反向传播

尽管我不是很喜欢反向传播这个名词，然而这里似乎不得不用上这个名字了。

现在又有了$\boldsymbol{W}_{ji}$ $\boldsymbol{W}_{ji}$，那么这些参数怎么训练呢？答案是反向传播。读者也许比较晕的是：现在既有动态路由，又有反向传播了，究竟两者怎么配合？其实这个真的就最简单不过了。就好像“小菜1”那样，把算法的迭代几步（论文中是3步），加入到模型中，从形式上来看，就是往模型中添加了三层罢了，剩下的该做什么还是什么，最后构建一个loss来反向传播。

这样看来，**Capsule里边不仅有反向传播，而且只有反向传播，因为动态路由已经作为了模型的一部分，都不算在迭代算法里边了**。

做了什么

是时候回顾一下了，Capsule究竟做了什么？其实用一种最直接的方式来讲，Capsule就是提供了一种新的“vector in vector out”的方案，这样看跟CNN、RNN、Attention层都没太大区别了；从Hinton的本意看，就是提供了一种新的、基于聚类思想来代替池化完成特征的整合的方案，这种新方案的特征表达能力更加强大。

实验

MNIST分类

不出意外地，Capsule首先被用在MNIST中做实验，然后效果还不错，通过扰动胶囊内的一些值来重构图像，确实发现这些值代表了某种含义，这也体现了Capsule初步完成了它的目标。

Capsule做分类模型，跟普通神经网络的一些区别是：Capsule最后输出10个向量（也就是10个胶囊），这10个向量各代表一类，每个向量的模长代表着它的概率。事实上，Capsule做的事情就是检测有没有这个类，也就是说，它把一个多分类问题转化为多个2分类问题。因此它并没有用普通的交叉熵损失，而是用了

$$L_c = T_c \max(0, m^+ - \|\boldsymbol{v}_c\|)^2 + \lambda(1-T_c)\max(0, \|\boldsymbol{v}_c\| - m^-)^2$$

$$L_c = T_c \max(0, m^+ - \|\boldsymbol{v}_c\|)^2 + \lambda(1 - T_c) \max(0, \|\boldsymbol{v}_c\| - m^-)^2$$

其中T_c T_c非零即1，表明是不是这个类。当然这个没什么特殊性，也可以有多种选择。论文中还对比了加入重构网络后的提升。

总的来说，论文的实验有点粗糙，选择mnist来做实验显得有点不给力（好歹也得玩玩fashion mnist嘛），重构网络也只是简单粗暴地堆了两层全连接来做。不过就论文的出发点，应该只要能证明这个流程能work就好了，因此差强人意吧。

我的实验

由于普通的卷积神经网络下，mnist的验证集准确率都已经99%+了，因此如果就这样说Capsule起作用了，难免让人觉得不服气。这里我为Capsule设计了一个新实验，虽然这个实验也是基于mnist，但这个实验能**很充分说明了Capsule具有良好的整合特征的能力。Capsule不仅work，还work得很漂亮。**

实验是这样的：

> 1、通过现有的MNIST数据集，训练一个数字识别模型，但最后不用softmax做10分类，而是转化为10个2分类问题，显然，这个使用旧的CNN+Pooling或现在的CNN+Calsupe都能做；
>
> 2、训练完模型后，用模型进行测试。测试的图片并不是原始的测试集，是随机挑两张测试集的图片拼在一起，然后看模型能不能预测出这两个数字来（数字对即可，不考虑顺序）。
>
> **也就是说，训练集是1对1的，测试集是2对2的。**

实验用Keras完成，完成的代码可见**我的Github**。这里仅仅展示核心部分。

首先是CNN。公平起见，大家的CNN模型都是一样的

```
#CNN部分，这部分两个模型都一致
input_image = Input(shape=(None,None,1))
cnn = Conv2D(64, (3, 3), activation='relu')(input_image)
cnn = Conv2D(64, (3, 3), activation='relu')(cnn)
cnn = AveragePooling2D((2,2))(cnn)
cnn = Conv2D(128, (3, 3), activation='relu')(cnn)
cnn = Conv2D(128, (3, 3), activation='relu')(cnn)
```

然后先用普通的Pooling+全连接层进行建模：

```
cnn = GlobalAveragePooling2D()(cnn)
dense = Dense(128, activation='relu')(cnn)
output = Dense(10, activation='sigmoid')(dense)

```

```
model = Model(inputs=input_image, outputs=output)
model.compile(loss=lambda y_true,y_pred: y_true*K.relu(0.9-y_pred)**2 + 0.25*(1-
              optimizer='adam',
              metrics=['accuracy'])
```

这个代码的参数量约为27万，能在mnist的标准测试集上达到99.3%以上的准确率，显然已经接近最佳状态。下面测试我们开始制定的任务，我们最后输出两个准确率：第一个准确率是取分数最高的两个类别；第二个准确率是取得分最高的两个类别，并且这两个类别的分数都要超过0.5才认可（因为是2分类）。代码如下：

```
#对测试集重新排序并拼接到原来测试集，就构成了新的测试集，每张图片有两个不同数字
idx = range(len(x_test))
np.random.shuffle(idx)
X_test = np.concatenate([x_test, x_test[idx]], 1)
Y_test = np.vstack([y_test.argmax(1), y_test[idx].argmax(1)]).T
X_test = X_test[Y_test[:,0] != Y_test[:,1]] #确保两个数字不一样
Y_test = Y_test[Y_test[:,0] != Y_test[:,1]]
Y_test.sort(axis=1) #排一下序，因为只比较集合，不比较顺序

Y_pred = model.predict(X_test) #用模型进行预测
greater = np.sort(Y_pred, axis=1)[:,-2] > 0.5 #判断预测结果是否大于0.5
Y_pred = Y_pred.argsort()[:,-2:] #取最高分数的两个类别
Y_pred.sort(axis=1) #排序，因为只比较集合

acc = 1.*(np.prod(Y_pred == Y_test, axis=1)).sum()/len(X_test)
print u'不考虑置信度的准确率为：%s'%acc
acc = 1.*(np.prod(Y_pred == Y_test, axis=1)*greater).sum()/len(X_test)
print u'考虑置信度的准确率为：%s'%acc
```

经过重复测试，如果不考虑置信度，那么准确率大约为40%，如果考虑置信度，那么准确率是10%左右。这是一组保守的数据，反复测试几次的话，很多时候连这两个数字都不到。

现在我们来看Capsule的表现，将CNN后面的代码替换成

```
capsule = Capsule(10, 16, 3, True)(cnn)
output = Lambda(lambda x: K.sqrt(K.sum(K.square(x), 2)))(capsule)

model = Model(inputs=input_image, outputs=output)
model.compile(loss=lambda y_true,y_pred: y_true*K.relu(0.9-y_pred)**2 + 0.25*(1-
              optimizer='adam',
              metrics=['accuracy'])
```

这里用的就是共享权重版的Capsule，最后输出向量的模长作为分数，loss和optimizer都跟前面一致，代码的参数量也约为27万，在mnist的标准测试集上的准确率同样也是99.3%左右，这部分两者都差不多。

然而，让人惊讶的是：在前面所定制的新测试集上，Capsule模型的两个准确率都有90%以上！即使我们没有针

对性地训练，但Capsule仍以高置信度给出了输入中包含的特征（即哪个数字）

当然，如果构造双数字的训练集让普通的CNN+Pooling训练，那么它也能work得很好，因此不是说旧的架构不能work，而是旧的架构迁移能力不够好。说白了，那就是普通的CNN+Pooling每一个任务都要“手把手”教才行，而Capsule则具有一定的举一反三的能力，后者是我们真正希望的。

思考

看起来还行

Capsule致力于给出神经网络的可解释的方案，因此，从这个角度来看，Capsule应该是成功的，至少作为测试版是很成功的。因为它的目标并不是准确率非常出众，而是对输入做一个优秀的、可解释的表征。从我上面的实验来看，Capsule也是很漂亮的，至少可以间接证明它比池化过程更接近人眼的机制。

事实上，通过向量的模长来表示概率，这一点让我想起了量子力学的波函数，它也是通过波函数的范数来表示概率的。这告诉我们，未来Capsule的发展也许可以参考一下量子力学的内容。

亟待优化

显然，Capsule可优化的地方还有非常多，包括理论上的和实践上的。我觉得整个算法中最不好看的部分并非动态路由，而是那个$squash$*squash*函数。对于非输出层，这个压缩究竟是不是必要的？还有，由于要用模长并表示概率，模长就得小于1，而两个模长小于1的向量加起来后模长不一定小于1，因此需要用函数进一步压缩，这个做法的主观性太强。这也许需要借助流形上的分析工具，才能给出更漂亮的解决方案，或者也可以借鉴一下量子力学的思路，因为量子力学也存在波函数相加的情况。

实践角度来看，Capsule显然是太慢了。这是因为将聚类的迭代过程（动态路由）嵌入了神经网络中。从前向传播来看，这并没有增加多少计算量，但从反向传播来看，计算量暴增了，因为复合函数的梯度会更加复杂。

反向传播好不好？

Hinton想要抛弃反向传播的大概原因是：反向传播在生物中找不到对应的机制，因为反向传播需要精确地求导数。

事实上，我并不认同这种观点。尽管精确求导在自然界中很难存在，但这才意味着我们的先进。试想一下，如果不求导，那么我们也可以优化的，但需要“试探＋插值”，比如将参数αα从3改为5后，发现loss变小了，于是我们就会想着试试$\alpha = 7$α = 7，如果这时候loss变大了，我们就会想着试试$\alpha = 6$α = 6。loss变小/大就意味着（近似的）梯度为负/正，这个过程的思想跟梯度下降是一致的，但这个过程一次性只能调节一个参数，而我们可能有数百万的参数要调，需要进行上百万次试验要才能完成每一个参数的调整。而求梯度，就是一种比重复试探更加高明的技巧，一次性作全部调整，何乐而不用呢？

池化好不好？

Hinton认为卷积中的池化是不科学的，但我并不这样认为，池化好不好，得看用在哪里。也许对于MNIST这个28*28的数据集并不需要池化也能work，但如果是1000*1000的大图呢？越远的东西就越看不清，这难道不是池化的结果？

所以我认为池化也是可取的，不过池化应该对低层的特征进行，高层的信息池化可能就会有问题了，尤其是CNN的最后一层，已有的模型一般都是用Global Pooling（如我的实验模型所示），这会极大地降低特征的迁移能力（比如实验中单数字模型能不能直接用来测试多数字）。退一步讲，如果坚决不用池化，那我用stride=2的卷积，不跟stride=1的卷积后接一个大小为2的池化是类似的吗？笔者前面的Capsule实验中，也将池化跟Capsule配合使用了，效果也没有变糟。

结语

这应该是到目前为止我写的最长的单篇博客了～不知道大家对这个Capsule饭局满不满意呢？

最后不得不吐槽一下，Hinton真会起名字，把神经网络重新叫做深度学习，然后深度学习就火了，现在把聚类的迭代算法放到神经网络中，称之为做动态路由，不知道会不会再次重现深度学习的辉煌呢？（笑，闪～）

转载到请包括本文地址：https://kexue.fm/archives/4819
更详细的转载事宜请参考：《科学空间FAQ》

如果您需要引用本文，请参考：

苏剑林. (2018, Jan 23). 《揭开迷雾，来一顿美味的Capsule盛宴 》[Blog post]. Retrieved from https://kexue.fm/archives/4819

Processing math: 100%