第二门课 改善深层神经网络：超参数调试、正则化以及优化(Improving Deep Neural Networks:Hyperparameter tuning, Regularization and Optimization)

第一周：深度学习的实践层面(Practical aspects of Deep Learning)

机器学习基础（Basic Recipe for Machine Learning）

训练神经网络时，我们需要做出很多决策，例如：

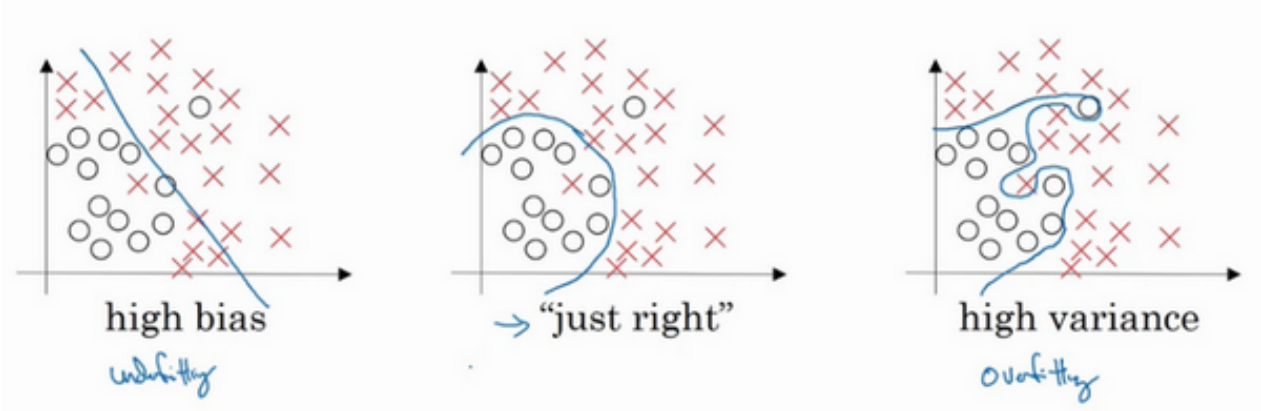
1. 神经网络分多少层
2. 每层含有多少个隐藏单元
3. 学习速率是多少
4. 各层采用哪些激活函数

而这些参数都是未知的，我们一般通过验证集来选择。

机器学习发展的小数据量时代对数据划分：将所有数据三七分，就是人们常说的70%验证集，30%测试集，如果没有明确设置验证集，也可以按照60%训练，20%验证和20%测试集来划分。

大数据时代：将样本分成训练集，验证集和测试集三部分，数据集规模相对较小，适用传统的划分比例，数据集规模较大的，验证集和测试集要小于数据总量的20%或10%。

偏差和方差



如果给这个数据集拟合一条直线，可能得到一个逻辑回归拟合，但它并不能很好地拟合该数据，这是高偏差（**high bias**）的情况，我们称为"欠拟合"（**underfitting**）。

如果我们拟合一个非常复杂的分类器，比如深度神经网络或含有隐藏单元的神经网络，可能就非常适用于这个数据集，但是这看起来也不是一种很好的拟合方式分类器方差较高（**high variance**），数据过度拟合（**overfitting**）。

训练集误差小，而测试集误差大：高方差

训练集误差大，而测试集误差类似：高偏差

训练集误差大，而测试集误差也大得多：高方差&&高偏差

训练集误差小，而测试集误差类似：低方差&&低偏差

初始模型训练完成后。

首先判断算法的偏差高不高：如果偏差较高，试着评估训练集或训练数据的性能。如果偏差的确很高，甚至无法拟合训练集，那么你要做的就是选择一个新的网络，比如含有更多隐藏层或者隐藏单元的网络，或者花费更多时间来训练网络，或者尝试更先进的优化算法。

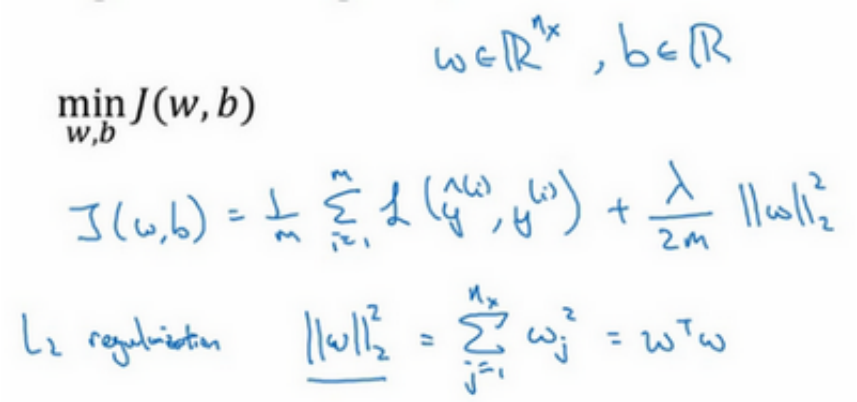
然后检查方差：采用更多数据或通过正则化来减少过拟合

只要正则适度，通常构建一个更大的网络便可以，在不影响方差的同时减少偏差，而采用更多数据通常可以在不过多影响偏差的同时减少方差。

正则化（Regularization）

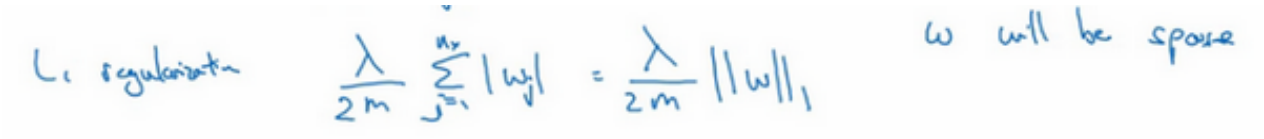
如果你怀疑神经网络过度拟合了数据，即存在高方差问题，那么最先想到的方法可能是正则化，另一个解决高方差的方法就是准备更多数据。

逻辑回归正则化：

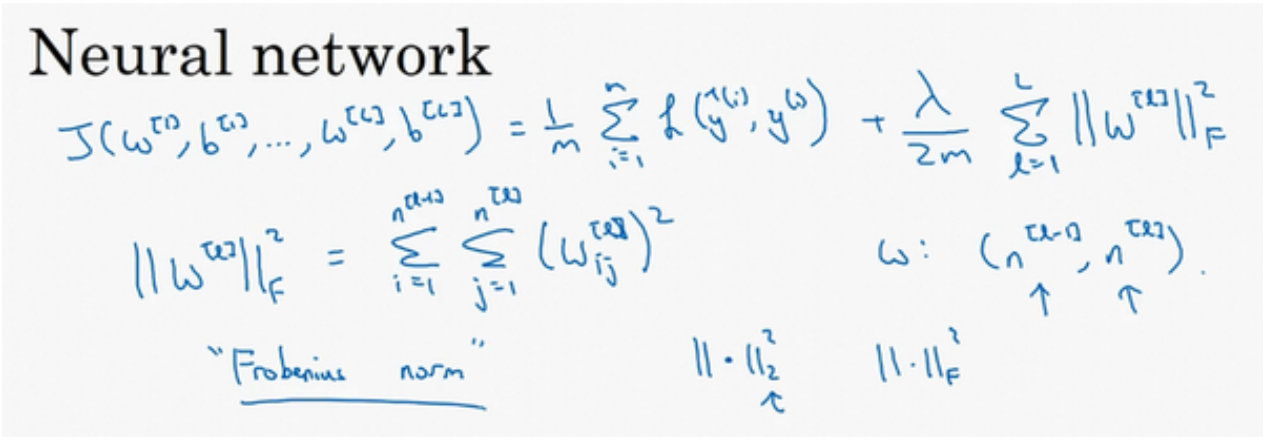


此方法称为L2正则化。因为这里用了欧几里德法线，被称为向量参数w的L2范数。

L1正则化：



神经网络正则化：

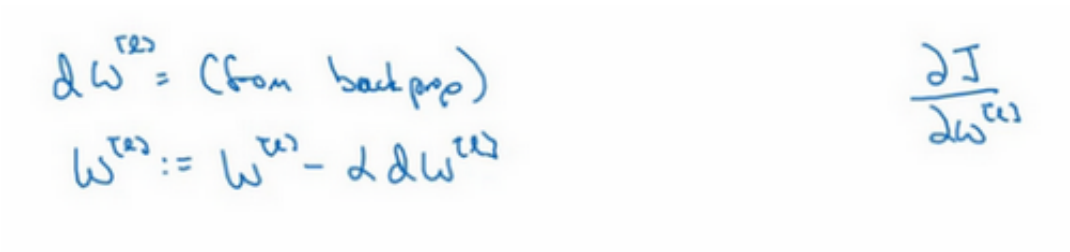


该正则项为：

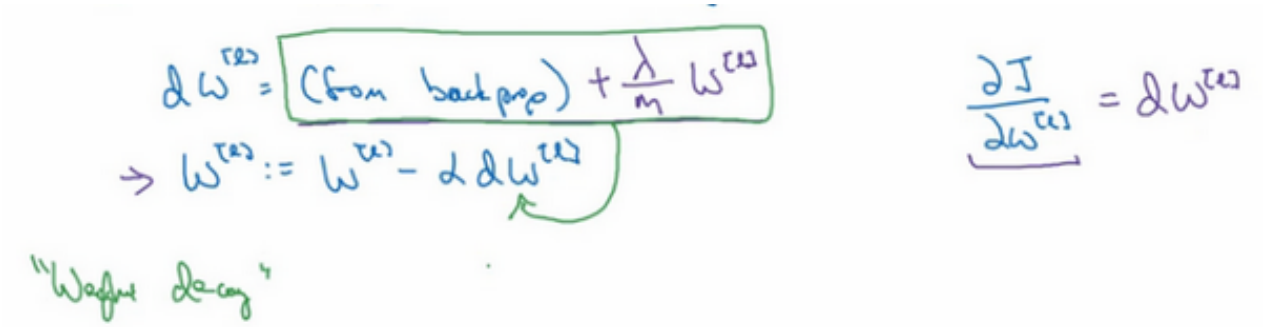
该矩阵范数被称作“弗罗贝尼乌斯范数”，用下标F标注，它表示一个矩阵中所有元素的平方和。

使用该范数实现梯度下降：

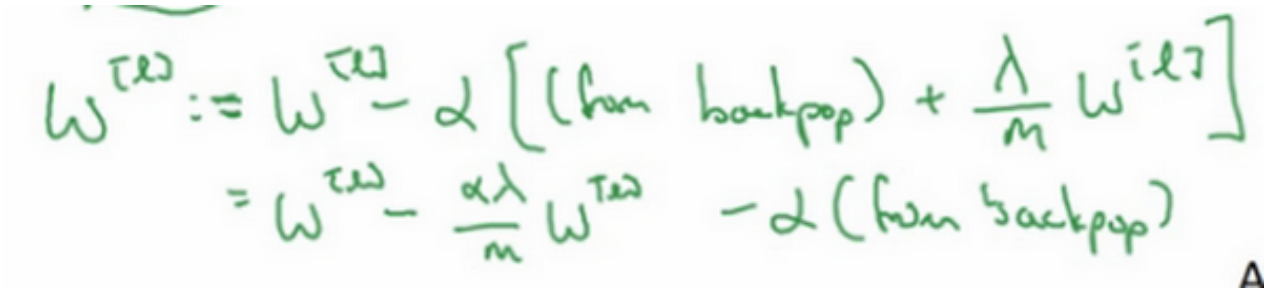
首先通过后向传播计算dW



给dW加上这一项:



w更新为：



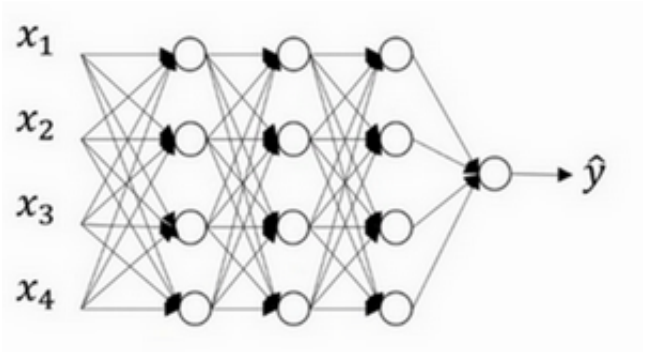
如果正则化设置得足够大，权重矩阵被设置为接近于0的值，直观理解就是把多隐藏单元的权重设为0，于是基本上消除了这些隐藏单元的许多影响。如果是这种情况，这个被大大简化了的神经网络会变成一个很小的网络，小到如同一个逻辑回归单元，可是深度却很大，它会使这个网络从过度拟合的状态更接近高偏差状态。

但是会存在一个中间值lambda，于是会有一个接近“**Just Right**”的中间状态。

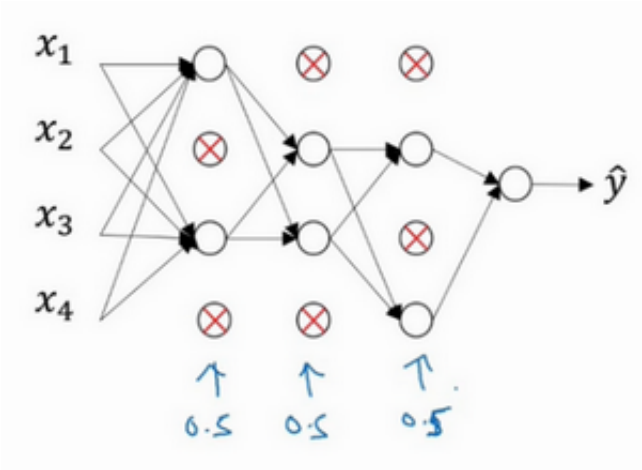
直观理解就是lambda增加到足够大，W会接近于0，实际上是不会发生这种情况的，我们尝试消除或至少减少许多隐藏单元的影响，最终这个网络会变得更简单，这个神经网络越来越接近逻辑回归，我们直觉上认为大量隐藏单元被完全消除了，其实不然，实际上是该神经网络的所有隐藏单元依然存在，但是它们的影响变得更小了。神经网络变得更简单了，貌似这样更不容易发生过拟合，不确定这个直觉经验是否有用，不过在编程中执行正则化时，可以实际看到一些方差减少的结果。

dropout 正则化（Dropout Regularization）

Dropout（随机失活）工作原理：



假设你在训练上图这样的神经网络，它存在过拟合，这就是**dropout**所要处理的，我们复制这个神经网络，**dropout**会遍历网络的每一层，并设置消除神经网络中节点的概率。假设网络中的每一层，每个节点都以抛硬币的方式设置概率，每个节点得以保留和消除的概率都是0.5，设置完节点概率，我们会消除一些节点，然后删除掉从该节点进出的连线，最后得到一个节点更少，规模更小的网络，然后用**backprop**方法进行训练。



Dropout实现：

最常用的实现方法：**inverted dropout**（反向随机失活）

首先定义一个向量d，用一个三层（l=3）网络来举例说明

d3 = np.random.rand(a3.shape[0],a3.shape[1])

然后看它是否小于某数，我们称之为**keep-prob**，**keep-prob**是一个具体数字，它表示保留某个隐藏单元的概率，此处**keep-prob**等于0.8，它意味着消除任意一个隐藏单元的概率是0.2，它的作用就是生成随机矩阵。

从第三层中获取激活函数a

a3 =np.multiply(a3,d3)，它的作用就是让d3中所有等于0的元素（输出），而各个元素等于0的概率只有20%，乘法运算最终把d3中相应元素输出，即让d3中0元素与a3中相对元素归零。

最后，我们向外扩展a3，用它除以0.8，或者除以**keep-prob**参数。

a3 = a3/keep-prob

如果**keep-prop**设置为1，那么就不存在**dropout**，因为它会保留所有节点。反向随机失活（**inverted dropout**）方法通过除以**keep-prob**，确保a3的期望值不变。

其他正则化方法（Other regularization methods）

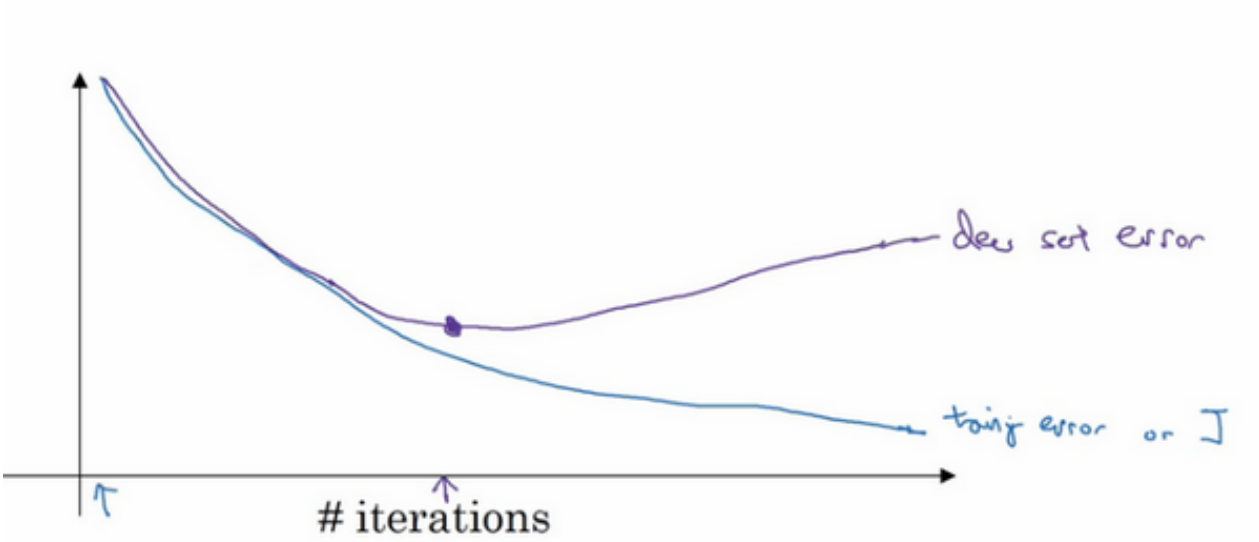
1.数据扩增

假设你正在拟合猫咪图片分类器，如果你想通过扩增训练数据来解决过拟合，但扩增数据代价高，而且有时候我们无法扩增数据，但我们可以通过添加这类图片来增加训练集。例如，水平翻转图片

类似于：

2.**early stopping**

绘画训练集和验证集上的分类误差，或验证集上的代价函数



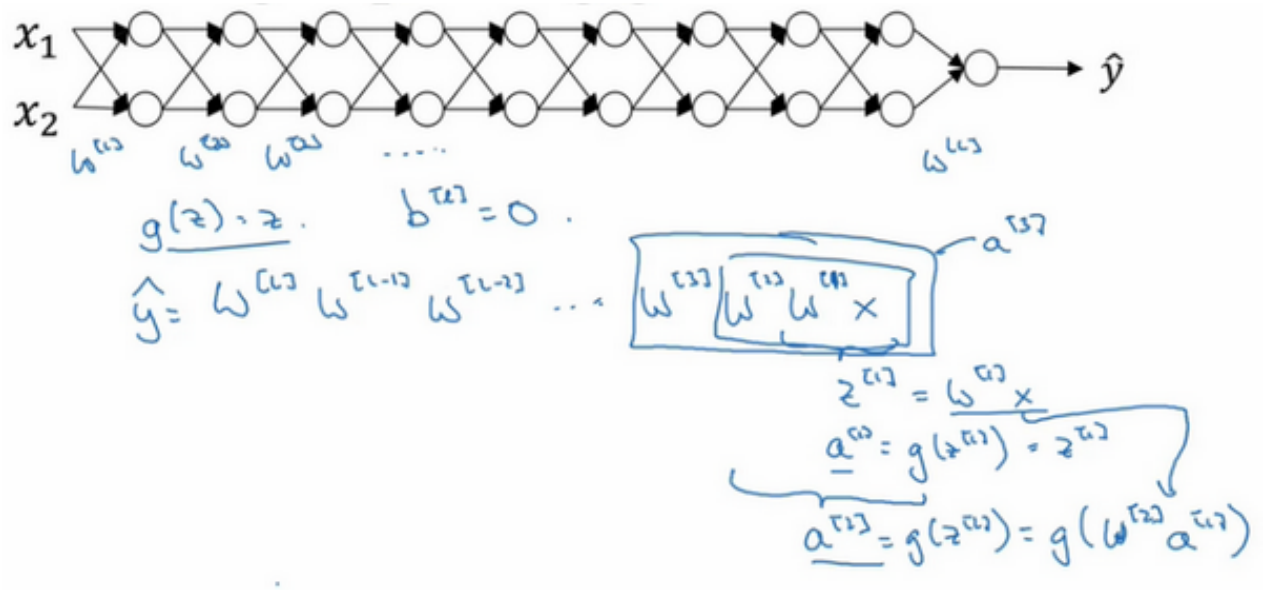
early stopping要做就是在中间点停止迭代过程，我们得到一个值中等大小的弗罗贝尼乌斯范数，与正则化相似，选择参数w范数较小的神经网络，以保证神经网络过度拟合不严重。

主要缺点：不能独立地处理优化算法和预防过拟合这两个问题【能实现称为正交化】

优点：只运行一次梯度下降，你可以找出的较小值，中间值和较大值，而无需尝试L2正则化超级参数lambda的很多值。

梯度消失/梯度爆炸（Vanishing / Exploding gradients）

假设模型如下，且参数b为0



假设每个权重矩阵$W^{[l]} = \begin{bmatrix} 1.5 & 0 \\ 0 & 1.5 \end{bmatrix}$

对于一个深度神经网络，y的值将爆炸式增长。

若 $W^{[l]} = \begin{bmatrix} 0.5 & 0 \\ 0 & 0.5 \end{bmatrix}$

激活函数的值以指数级递减。

即深度神经网络是产生梯度消失或爆炸问题

一个不完整的解决方案：

设置

n表示神经元的输入特征数量

即设置权重矩阵为：

$$w^{[l]} = np.random.randn(\text{shape}) * \text{np.sqrt}(\frac{1}{n^{[l-1]}})$$

使用**Relu**激活函数：

$$\text{np.sqrt}(\frac{2}{n^{[l-1]}})$$

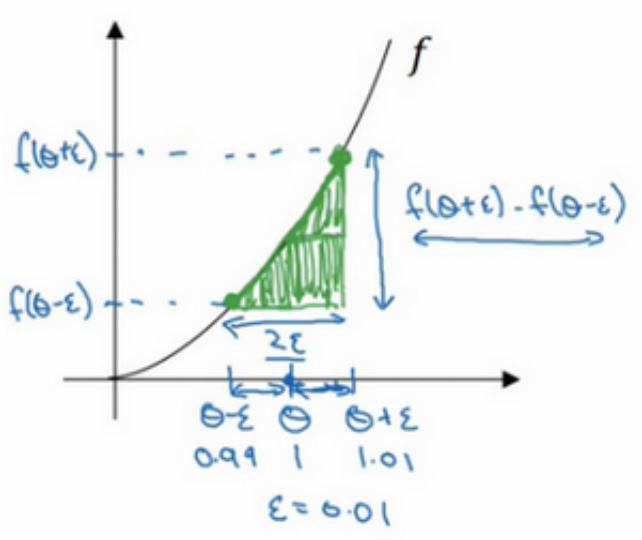
使用**tanh**函数：

$$\sqrt{\frac{1}{n^{[l-1]}}}$$

梯度检验（Gradient checking）

原理：

使用双边误差的方法更逼近导数



高宽比值为：$\frac{f(\theta+\varepsilon)-(\theta-\varepsilon)}{2\varepsilon}$

相对于单边误差的的高宽比值更接近于函数导数

使用**grad check**检验**backprop**的实施是否正确：

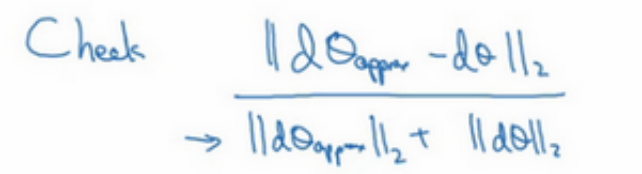
假设你的网络中含有参数w和b，为了执行梯度检验，首先要做的就是，把所有参数转换成一个巨大的向量数据，你要做的就是把矩阵W转换成一个向量，把所有W矩阵转换成向量之后，做连接运算，得到一个巨型向量$\boldsymbol{\theta}$，该向量表示为参数$\boldsymbol{\theta}$，代价函数是所有W和b的函数，现在你得到了一个的代价函数（即）J($\boldsymbol{\theta}$)

同理用dw和db得到d$\boldsymbol{\theta}$。

J是超参数$\boldsymbol{\theta}$的一个函数,使用双边误差对每个组成元素$\boldsymbol{\theta}$计算d$\boldsymbol{\theta}$approx的值

$$d\theta_{\text{approx}}\left[i\right]=\frac{J(\theta_1,\theta_2,\ldots\theta_i+\varepsilon,\ldots)-J(\theta_1,\theta_2,\ldots\theta_i-\varepsilon,\ldots)}{2\varepsilon}$$

d$\boldsymbol{\theta}$approx应该接近于d$\boldsymbol{\theta}$



ε可能为10-7，使用这个取值范围内的，如果你发现计算方程式得到的值为或更小，这就很好，这就意味着导数逼近很有可能是正确的，它的值非常小。

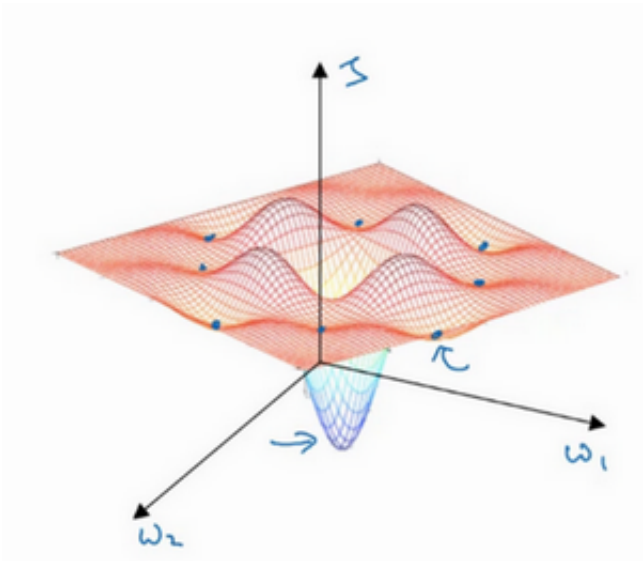
ε在范围10-5内，我就要小心了，也许这个值没问题，但我会再次检查这个向量的所有项，确保没有一项误差过大，可能这里有**bug**。

ε在范围10-3内，我就会担心是否存在**bug**，计算结果应该比小很多，如果比大很多，我就会很担心，担心是否存在**bug**。

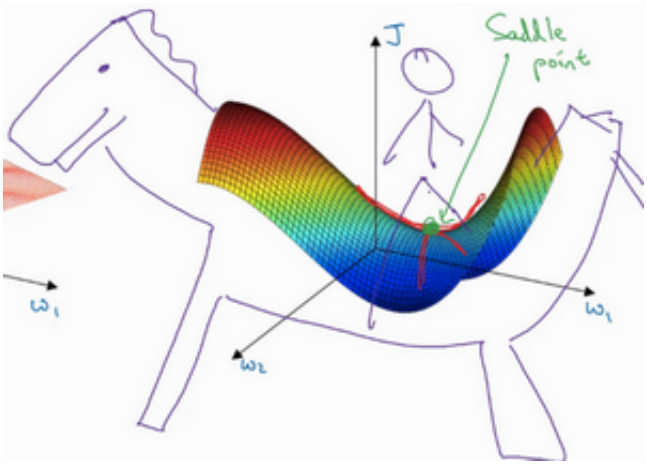
第二周：优化算法 (Optimization algorithms)

局部最优的问题(The problem of local optima)

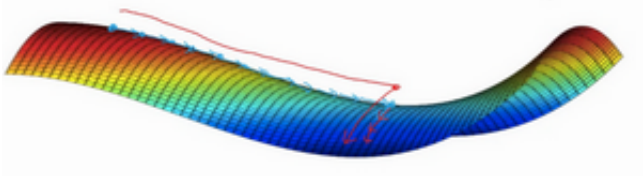
在深度学习研究早期，人们总是担心优化算法会困在极差的局部最优



但实际的高维曲面



更可能碰到鞍点，想象一下，就像是放在马背上的马鞍一样导数为0的点，这个点叫做鞍点



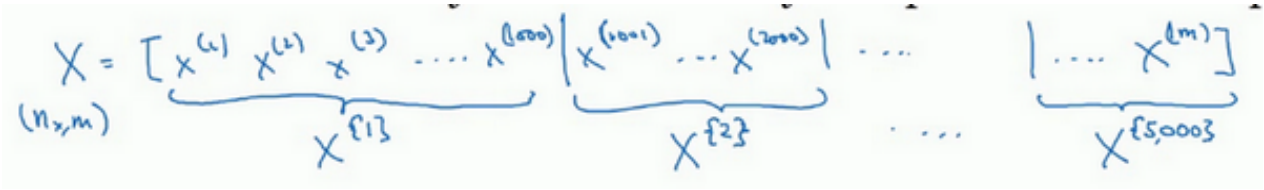
我们可以沿着这段长坡走，直到这里，然后走出平稳段。

此时就需要优化算法加速学习算法。

Mini-batch 梯度下降（Mini-batch gradient descent）

在巨大的数据集使用批量梯度下降来训练神经网络速度过慢，每一次需要遍历所有样本

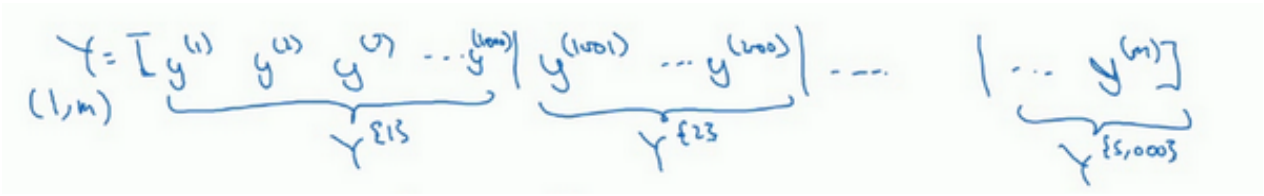
Mini-batch 梯度下降把训练集分割为小一点的子集训练，这些子集被取名为**mini-batch**。假设每一个子集中只有1000个样本，那么把其中1到1000取出来，将其称为第一个子训练集，也叫做**mini-batch**，以此类推。



500万个样本的训练集得到5000个**mini-batch**：$X^{\{5000\}}$

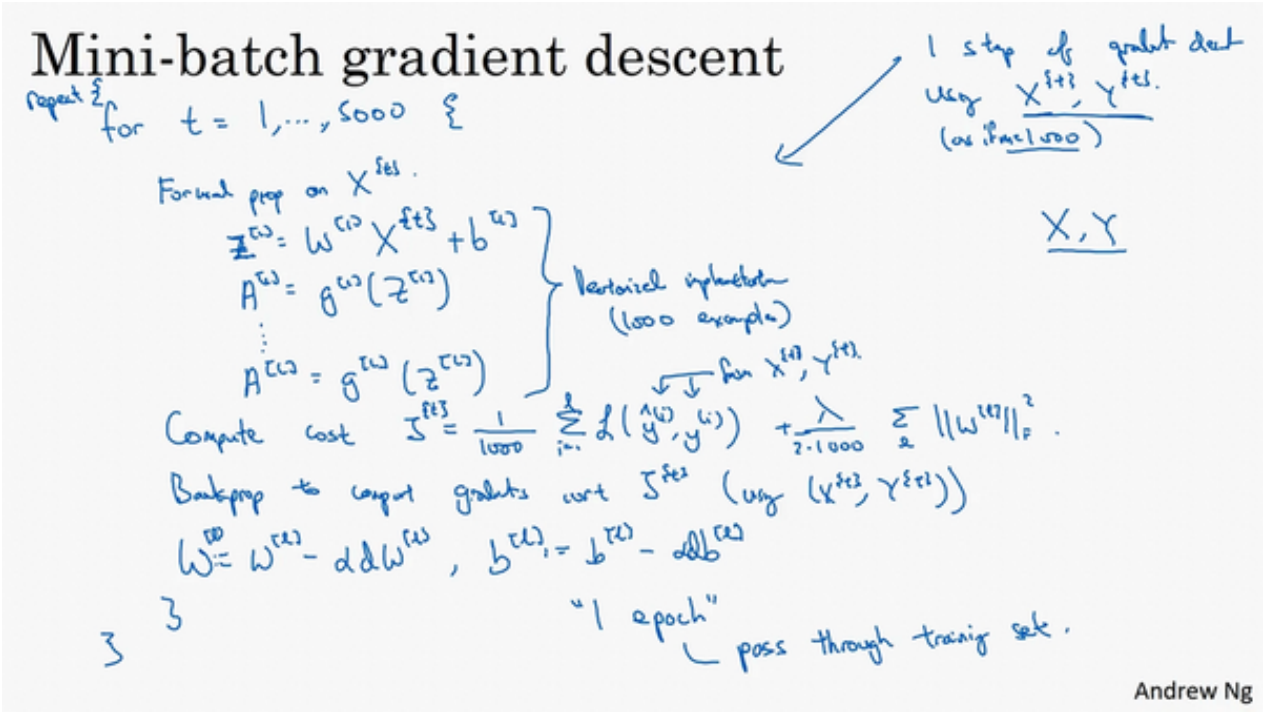
新的符号：把$x^{(1)}$到$x^{(1000)}$称为$X^{\{1\}}$，$x^{(1001)}$到$x^{(2000)}$称为$X^{\{2\}}$

对应处理Y



实现：

遍历**mini-batch**子集，在**for**循环里你要做得基本就是对每个X的子集t和Y的子集t进行梯度下降

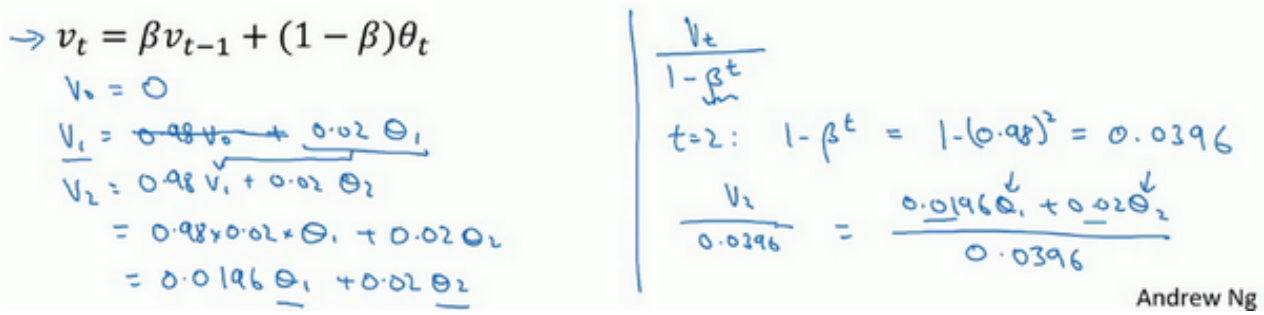


动量梯度下降法（Gradient descent with Momentum）

使用指数加权平均数（Exponentially weighted averages）进行计算

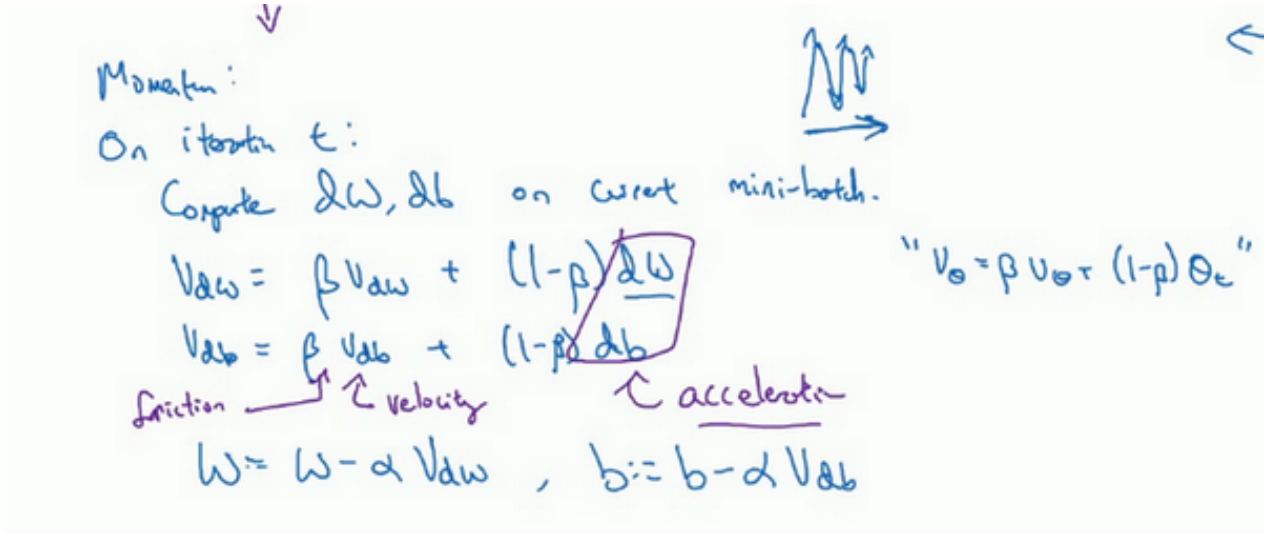
$$v_t = \beta v_{t-1} + (1-\beta)\theta_t$$

指数加权平均的偏差修正（Bias correction in exponentially weighted averages）：帮助你在早期获取更好的估测



但实际应用中一般不使用修正。

指数加权平均数应用到梯度下降得到**Momentum**



Implementation details

On iteration t:

Compute dW, db on the current mini-batch

$$v_{dW} = \beta v_{dW} + (1-\beta)dW$$

$$v_{db} = \beta v_{db} + (1-\beta)db$$

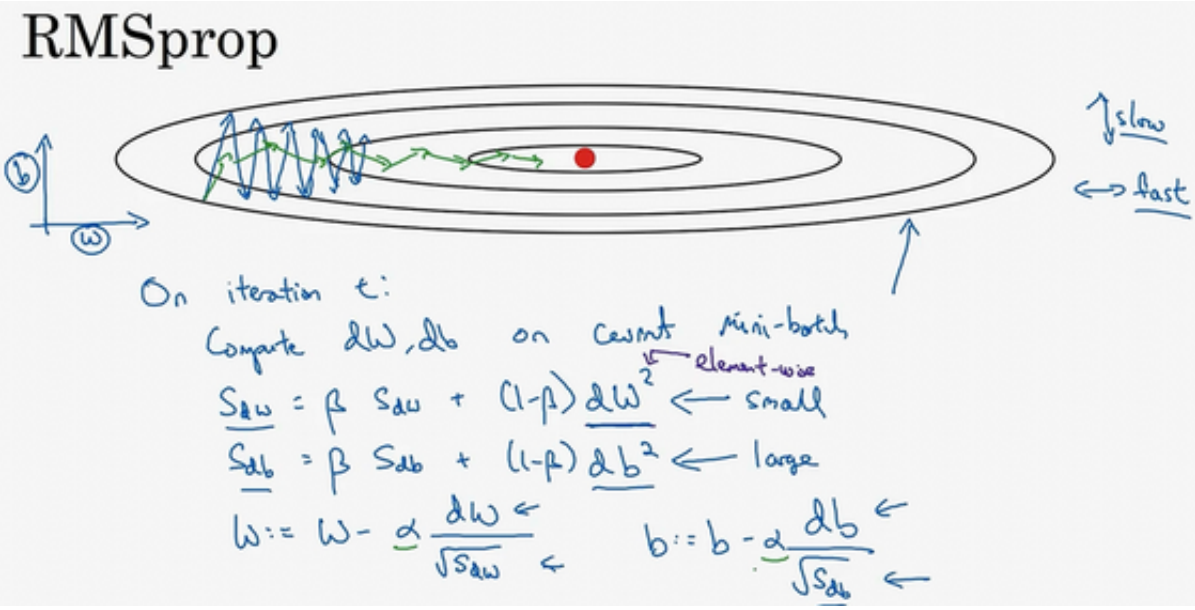
$$W = W - \alpha v_{dW},\ b = b - \alpha v_{db}$$

Hyperparameters: α, β $\beta = 0.9$

个算法肯定优于没有**Momentum**的梯度下降算法

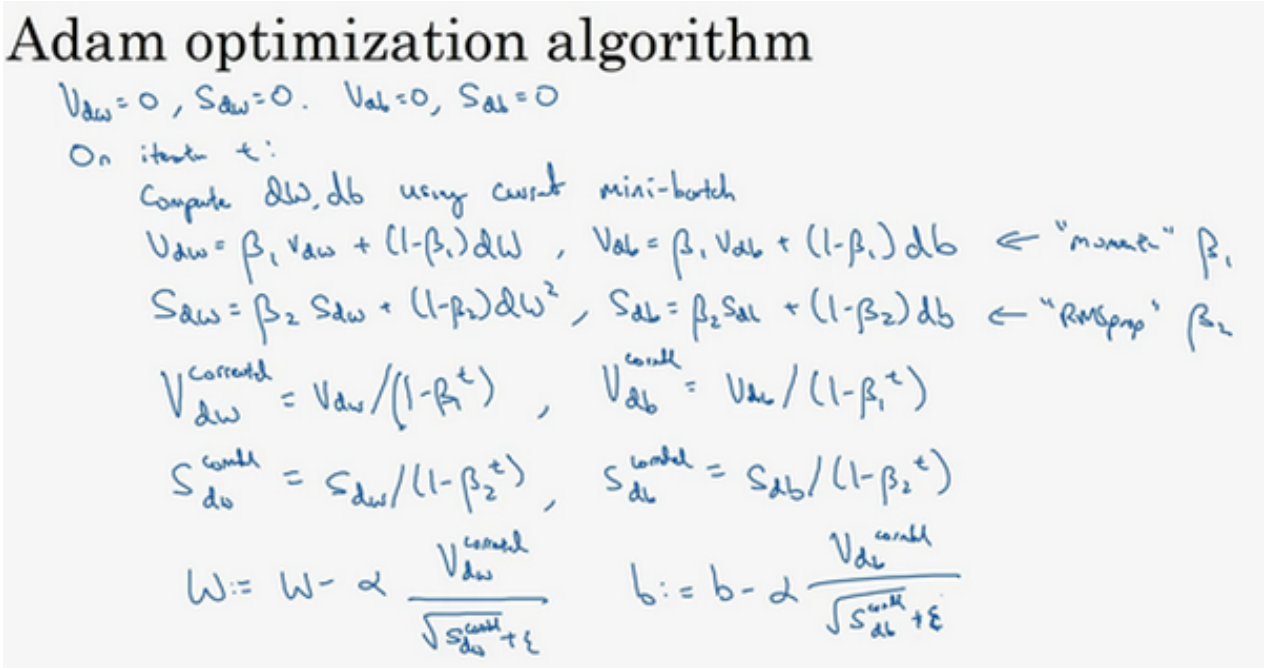
RMSprop

全称是**root mean square prop**算法

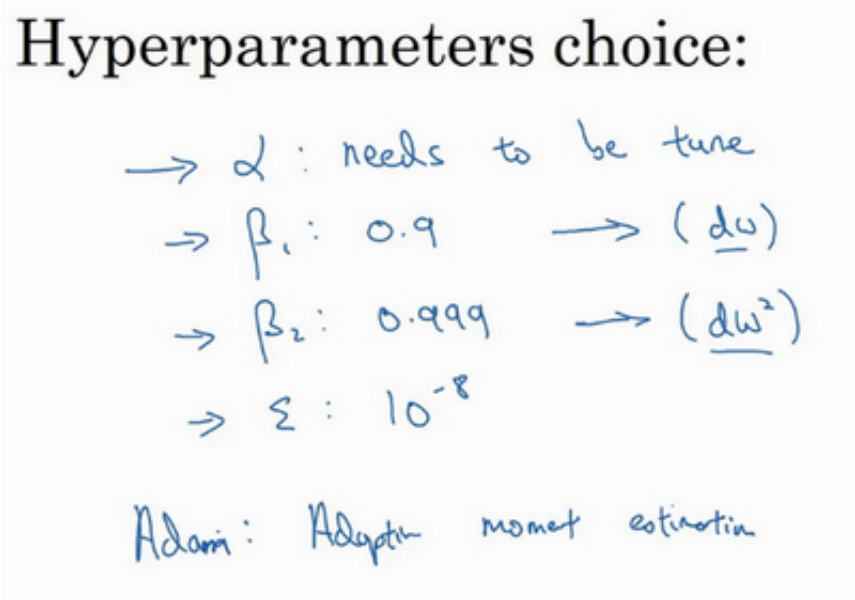


Adam 优化算法(Adam optimization algorithm)

Adam优化算法基本上就是将**Momentum**和**RMSprop**结合在一起。

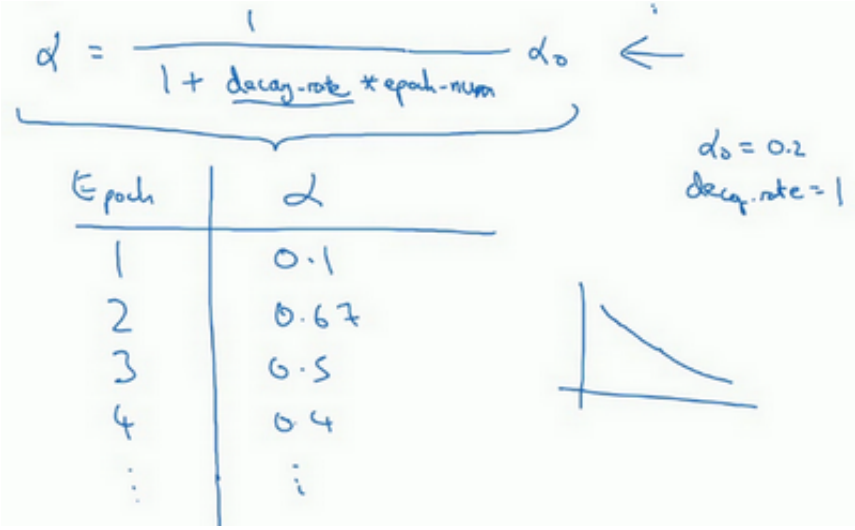


参数选择

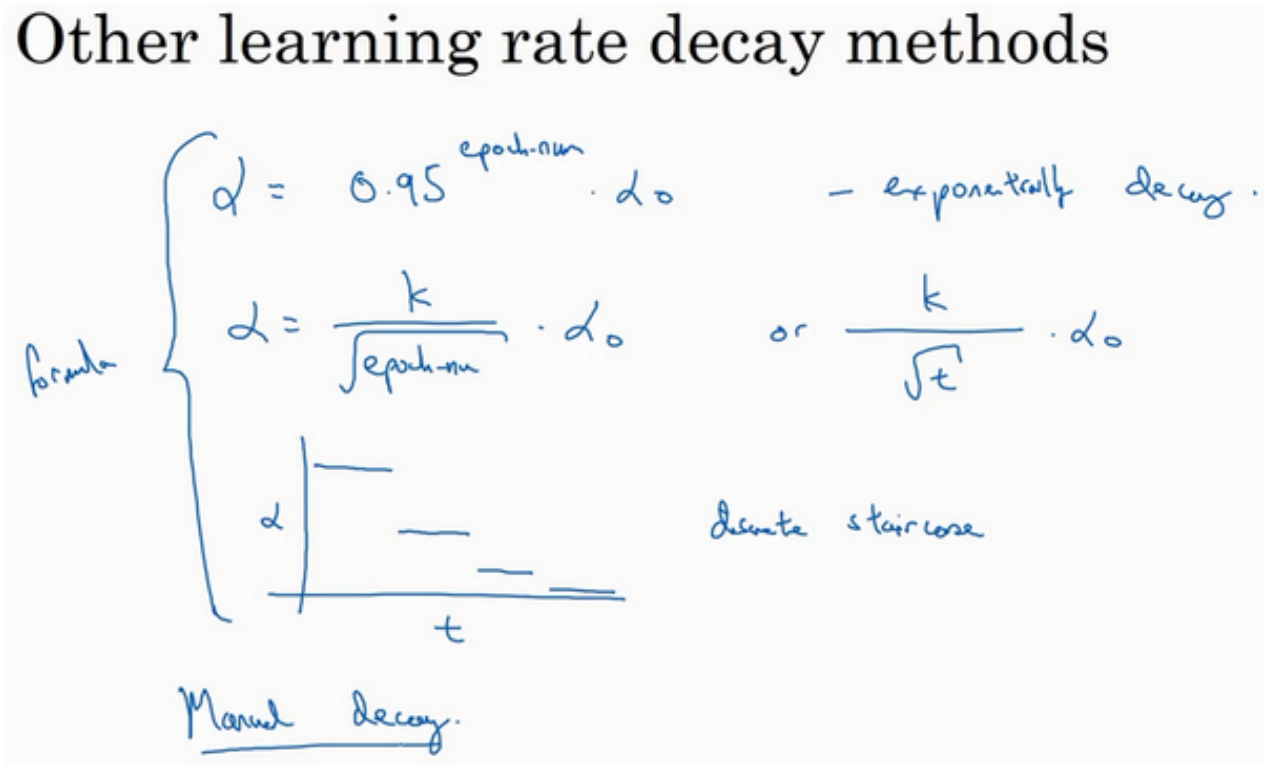


学习率衰减(Learning rate decay)

加快学习算法的一个办法就是随时间慢慢减少学习率，我们将之称为学习率衰减。



（**decay-rate**称为衰减率，**epoch-num**为迭代数，**α0**为初始学习率）



第三周 超参数调试、Batch正则化和程序框架（Hyperparameter tuning）

归一化网络的激活函数（Normalizing activations in a network）

γ和β的作用是可以随意设置新的z的平均值，通过赋予γ和β其它值，可以使你构造含其它平均值和方差的隐藏单元值。

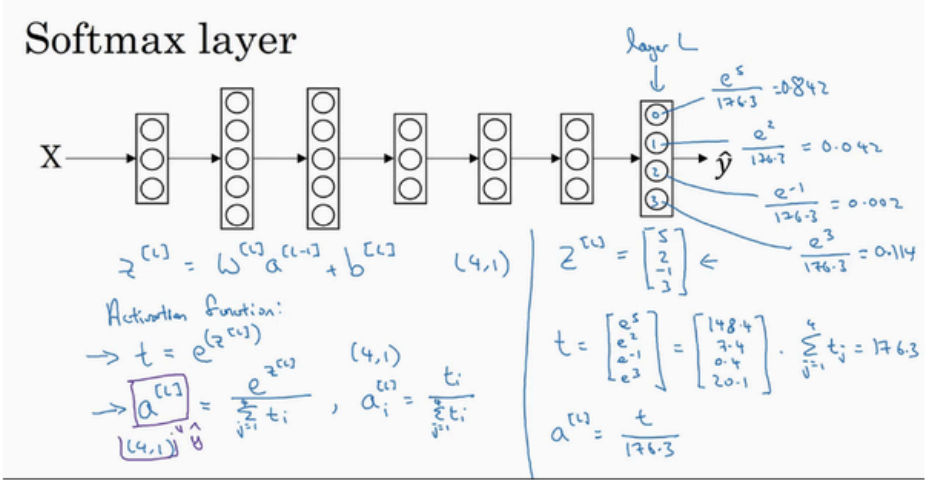
将 Batch Norm 拟合进神经网络（Fitting Batch Norm into a neural network）

Softmax 回归（Softmax regression）

logistic回归实现二分类，Softmax实现多分类

计算：【主要采用不同激活函数获得激活值】

我们来看一个例子，详细解释，假设你算出了$z^{[l]}$，$z^{[l]}$是一个四维向量，假设为$z^{[l]}=\begin{bmatrix}5\\2\\-1\\3\end{bmatrix}$，我们要做的就是用这个元素取幂方法来计算$t$，所以$t=\begin{bmatrix}e^5\\e^2\\e^{-1}\\e^3\end{bmatrix}$，如果你按一下计算器就会得到以下值$t=\begin{bmatrix}148.4\\7.4\\0.4\\20.1\end{bmatrix}$，我们从向量$t$得到向量$a^{[l]}$就只需要将这些项目归一化，使总和为1。如果你把$t$的元素都加起来，把这四个数字加起来，得到176.3，最终$a^{[l]}=\frac{t}{176.3}$。



Softmax输出高维向量，向量内各值代表各分类的概率