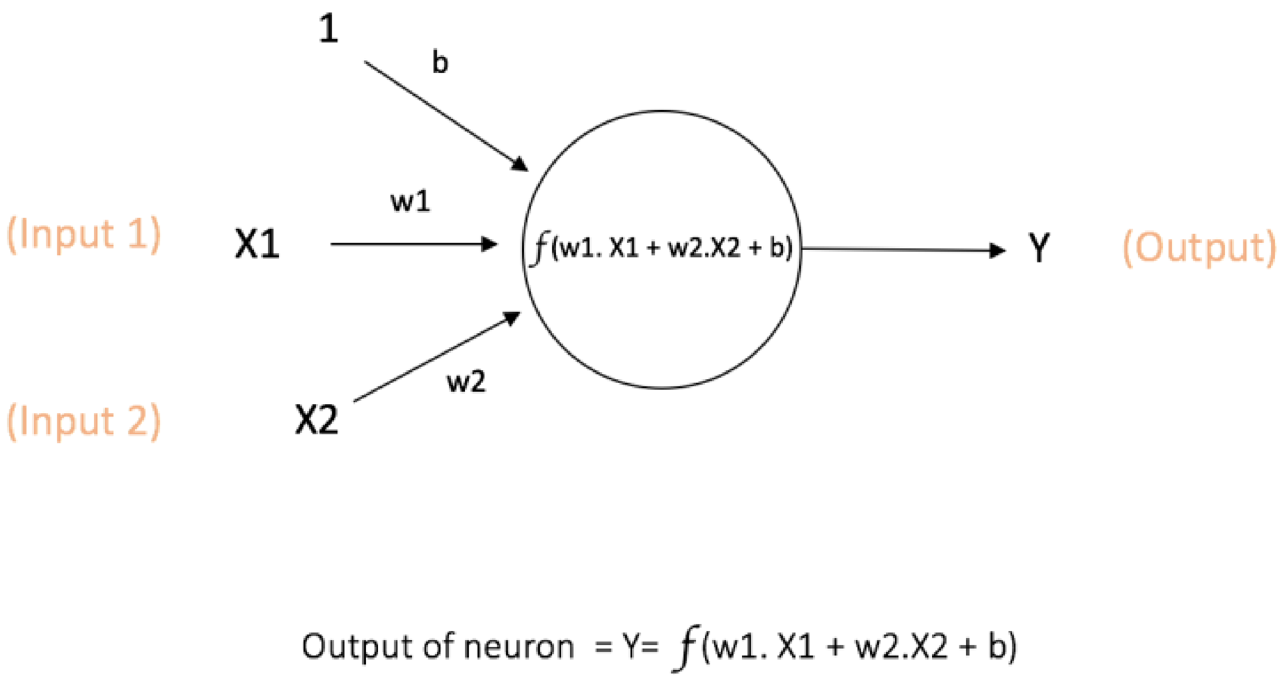
回顾和复习常见神经网络结构的底层原理————FNN（前馈神经网络）

Day1：FNN

1. 神经元(neuron)

神经元是神经网络的基本计算单元，也被称作**节点**(node)**或者单元**(unit)。它可以接受来自其他神经元的输入或者是外部的数据，然后计算一个输出。

每个输入值都有一个**权重**(weight)，权重的大小取决于这个输入相比于其他输入值的重要性。然后在神经元上执行一个特定的函数 f， 定义如下图所示，这个函数会该神经元的所有输入值以及其权重进行一个操作。

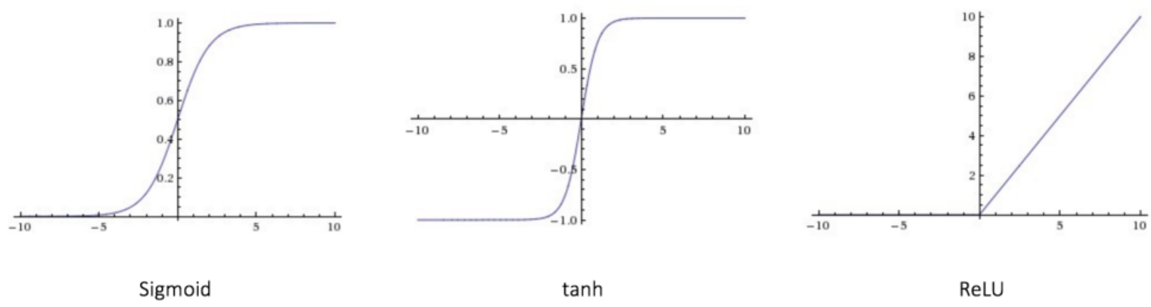


由上图可以看到，除了权重外，还有一个输入值是b的偏置值bias。这里的函数 f 就是一个被称为**激活函数**的**非线性**函数。它的目的是给神经元的输出引入非线性。因为在现实世界中的数据都是非线性的，因此我们希望神经元都可以学习到这些非线性的表示。

- 设置偏置值bias的原因

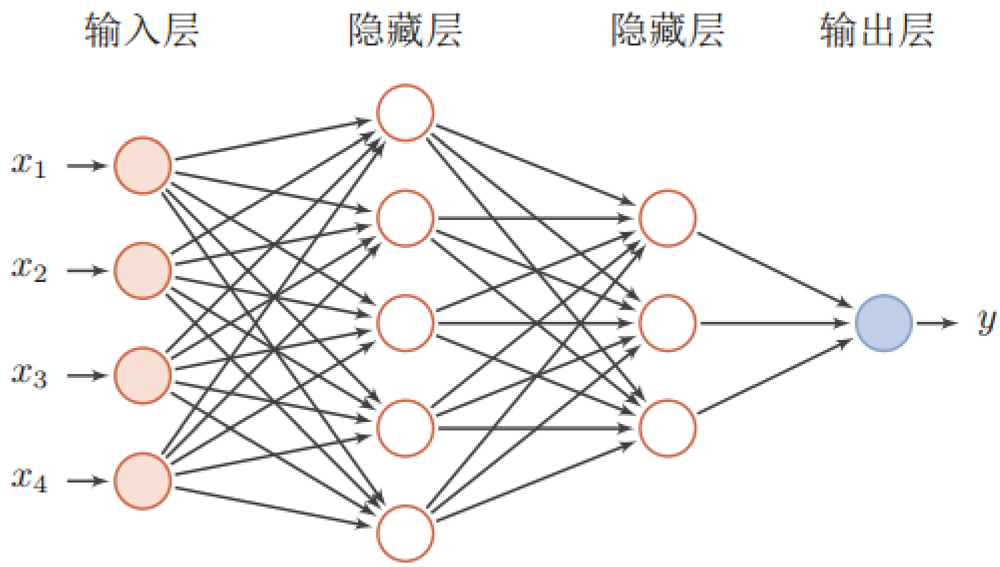
> `Y = kx + b` （直线方程）如果没有**bias**，这条线将始终穿过原点，并且`Y`的值只取决于一个参数k，即斜率。可能会得到更差的拟合。
>
> 而bias代表偏差，接受任何数字，并具有移动图形的活动，因此能够表示更复杂的情况。

- 常见的激活函数



2. FNN

　　前馈神经网络（Feedforward Neural Network， FNN ）第一个也是最简单的一种人工神经网络。其每一层的神经元可以接收前一层神经元的信号，并产生信号输出到下一层。第0层叫做输入层，最后一层叫做输出层，其他中间层叫做隐藏层。整个网络中无反馈，信号从输入层向输出层单向传播，可用一个有向无环图表示。



- **输入神经元**：位于输入层，主要是传递来自外界的信息进入神经网络中，比如图片信息，文本信息等，这些神经元不需要执行任何计算，只是作为传递信息，或者说是数据进入隐藏层。

- **隐藏神经元**：位于隐藏层，隐藏层的神经元不与外界有直接的连接，它都是通过前面的输入层和后面的输出层与外界有间接的联系，因此称之为隐藏层，上图只是有1个网络层，但实际上隐藏层的数量是可以有很多的，远多于1个，当然也可以没有，那就是只有输入层和输出层的情况了。隐藏层的神经元会执行计算，将输入层的输入信息通过计算进行转换，然后输出到输出层。
- **输出神经元**：位于输出层，输出神经元就是将来自隐藏层的信息输出到外界中，也就是输出最终的结果，如分类结果等。

假设l层共有M个节点，$l+1$层共有N个节点，W_{nm}^{l}是第l层第m个节点到第$l+1$层第n个节点的权重，b_n^{l+1}是第$l+1$层第n个节点的偏置，f_n^{l+1}是第$l+1$层第n个节点的偏置函数，则：

$$x_n^{l+1}=f_n^{l+1}\left(\sum_{m=1}^{M} w_{nm}^{l+1}x_m^{l}+b_n^{l+1}\right)$$

这样前馈神经网络通过逐层的信息传递，得到网络最后的输出

3. 反向传播

用神经网络对数据进行建模，就是要找到最合适的参数（权重和偏置）对数据进行最佳逼近。通常会设计一个损失函数来度量逼近效果，最优参数应使得损失函数最小化。神经网络可以视为一个非常复杂的复合函数，求解最优参数时，需要进行链式求导，形成了梯度的反向传播。（数学推导略）

输入: 训练集 $\mathcal{D}=\{(\mathbf{x}^{(n)},y^{(n)})\}_{n=1}^{N}$, 验证集 $\mathcal{V}$, 学习率 α, 正则化系数 λ, 网络层数 L, 神经元数量 $m^{(l)}$, $1\le l\le L$.

随机初始化 $W,\mathbf{b}$;
repeat
  对训练集 $\mathcal{D}$ 中的样本随机重排序;
  for $n=1\cdots N$ **do**
    从训练集 $\mathcal{D}$ 中选取样本 $(\mathbf{x}^{(n)},y^{(n)})$;
    前馈计算每一层的净输入 $\mathbf{z}^{(l)}$ 和激活值 $\mathbf{a}^{(l)}$，直到最后一层;
    反向传播计算每一层的误差 $\delta^{(l)}$; // 公式 (4.60)
    // 计算每一层参数的导数
    $\forall l,\quad \frac{\partial\mathcal{L}(\mathbf{y}^{(n)},\hat{\mathbf{y}}^{(n)})}{\partial W^{(l)}}=\delta^{(l)}(\mathbf{a}^{(l-1)})^{\mathrm{T}}$; // 公式 (4.62)
    $\forall l,\quad \frac{\partial\mathcal{L}(\mathbf{y}^{(n)},\hat{\mathbf{y}}^{(n)})}{\partial \mathbf{b}^{(l)}}=\delta^{(l)}$; // 公式 (4.63)
    // 更新参数
    $W^{(l)}\leftarrow W^{(l)}-\alpha(\delta^{(l)}(\mathbf{a}^{(l-1)})^{\mathrm{T}}+\lambda W^{(l)})$;
    $\mathbf{b}^{(l)}\leftarrow \mathbf{b}^{(l)}-\alpha\delta^{(l)}$;
  end
until 神经网络模型在验证集 $\mathcal{V}$ 上的错误率不再下降;
输出: $W,\mathbf{b}$

4.梯度消失和梯度爆炸

（1）原理

训练神经网络，尤其是深度神经网络时，面临的一个问题是梯度消失或者梯度爆炸，也就是神经元上的梯度会变得非常小或者非常大，从而加大训练的难度。

定义：梯度消失（Vanishing Gradient Problem，或称梯度弥散）的意思是，在误差反向传播的过程中，误差经过每一层传递都会不断衰减，当网络层数很深时，神经元上的梯度也会不断衰减，导致前面的隐含层神经元的学习速度慢于后面隐含层上的神经元。

$$\delta^{(l)} = f_l'(x^{(l)}) \odot (W^{(l+1)})^T \delta^{(l+1)}$$

误差从输出层反向传播时，在每一层都要乘以该层的激活函数的导数，如果导数$f_l'(x^{(l)})$的值域小于1，甚至如Sigmoid函数在两端的饱和区导数趋于0，那么梯度就会不断衰减甚至消失。

与之相对的问题是梯度爆炸（Exploding Gradient Problem），也就是前面层中神经元的梯度变得非常大。与梯度消失不太一样的是，梯度爆炸通常产生于过大的权重W。

梯度消失通常出现在深层网络和采用了不合适的损失函数（sigmoid）的情形，梯度爆炸一般出现在深层网络和权值初始化值太大的情况下。

- $sigmoid'(x) = sigmoid(x)(1 - sigmoid(x)) \in [0, 0.25]$

（2）解决

- **对于梯度消失问题，可以选择导数比较大的激活函数，比如ReLU激活函数。**

Sigmoid函数和Tanh函数都属于两端饱和型激活函数，使用这两种激活函数的神经网络，在训练过程中梯度通常会消失，因此可以选择其他激活函数来替代：

ReLU激活函数在正数部分的导数恒为1，每层网络都可以得到相同的更新速度，因此在深层网络中不会产生梯度消失和梯度爆炸的问题。

- **对于梯度爆炸问题，可以采取梯度截断和权重正则化的方法。**

梯度截断这个方案主要是针对梯度爆炸提出的，其思想是设置一个梯度截断阈值，然后在更新梯度的时候，如果梯度超过这个阈值，那么就将其强制限制在这个范围之内。

权重正则化就是在损失函数中，加入对网络的权重进行惩罚的正则化项，比如权重的L1正则化或者L2正则化。如果发生梯度爆炸，权值的范数会变得非常大，通过正则化项进行惩罚，可以限制权重的值，从而减轻梯度爆炸的问题。