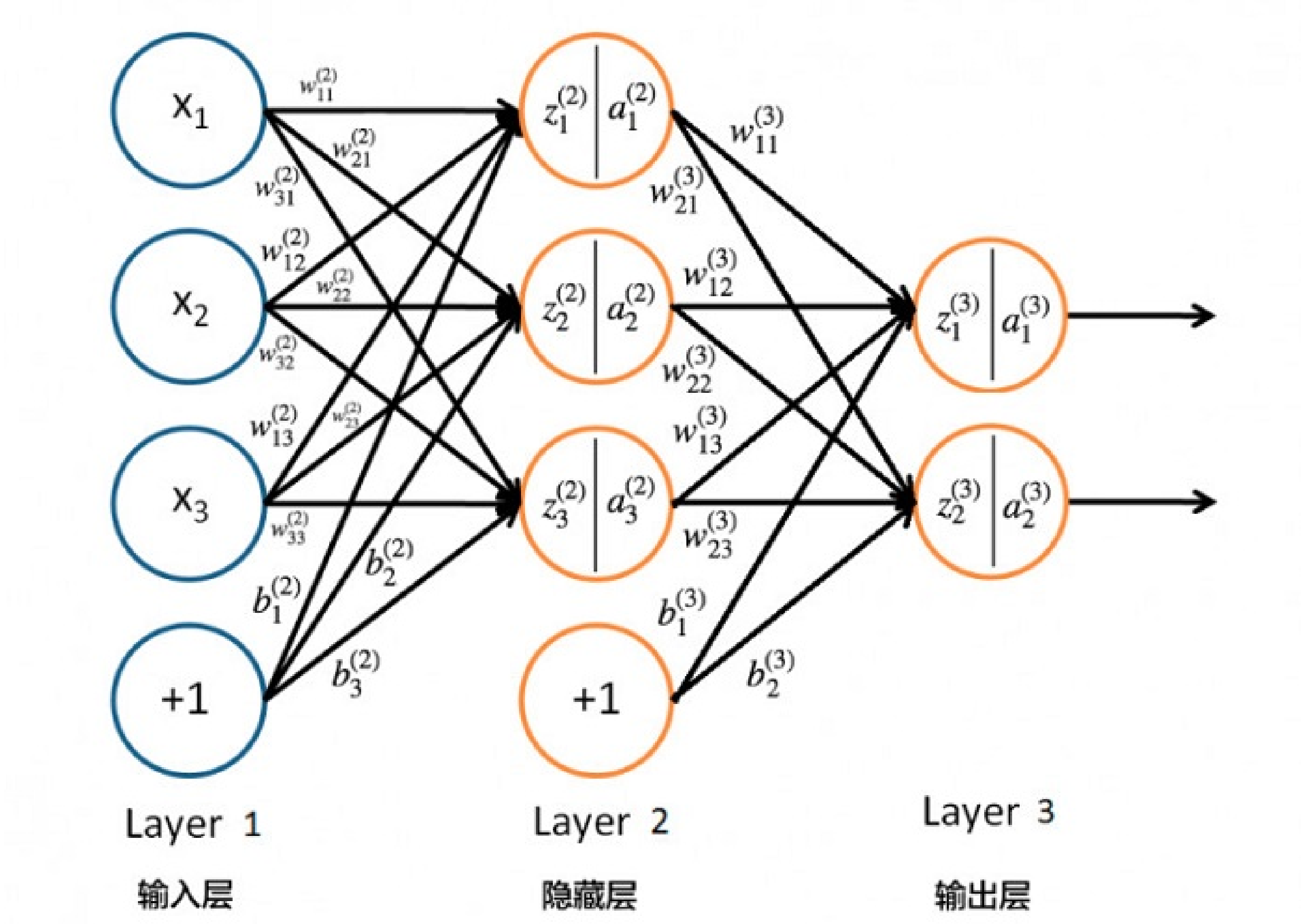
反向传播算法

杨航锋

反向传播算法是目前用来训练人工神经网络（Artificial Neural Network，ANN）的最常用且最有效的算法，其主要思想是：将训练集数据输入到ANN的输入层，经过隐藏层，最后达到输出层并输出结果，这是ANN的前向传播过程；由于ANN的输出结果与实际结果有误差，则先计算估计值与实际值之间的误差，并将该误差从输出层向隐藏层反向传播，直至传播到输入层；在反向传播的过程中，根据误差调整各种参数的值；不断迭代上述过程，直至收敛。[更多文章见GitHub地址]

反向传播算法的推导

符号约定



符号	含义
$w_{jk}^{(l)}$	从 $l-1$ 层的第 k 个神经元到第 l 层的第 j 个神经元之间的权重
$\boldsymbol{w}^{(l)}$	第 $l-1$ 层到 l 层的权重矩阵
$b_j^{(l)}$	第 l 层的第 j 个神经元的偏置
$\boldsymbol{b}^{(l)}$	第 l 层的偏置向量
$z_j^{(l)}$	第 l 层第 j 个神经元的输入值
$\boldsymbol{z}^{(l)}$	第 l 层的输入向量
$a_j^{(l)}$	第 l 层第 j 个神经元的激活值
$\boldsymbol{a}^{(l)}$	第 l 层的激活输出向量
$N^{(l)}$	第 l 层神经元的个数
$C^{(i)}(\theta)$	第 i 个输出对应的损失函数
$C(\theta)$	损失函数
$\delta_j^{(l)}$	损失函数在第 l 层的第 j 个神经元的误差
$\boldsymbol{\delta}^{(l)}$	损失函数在第 l 层的误差向量

综上有如下等式成立：

$$\begin{cases} z_1^{(l)} &= w_{11}^{(l)} a_1^{(l-1)} + w_{12}^{(l)} a_2^{(l-1)} + \cdots + w_{1N^{(l-1)}}^{(l)} a_{N^{(l-1)}}^{(l-1)} + b_1^{(l)} \\ z_2^{(l)} &= w_{21}^{(l)} a_1^{(l-1)} + w_{22}^{(l)} a_2^{(l-1)} + \cdots + w_{2N^{(l-1)}}^{(l)} a_{N^{(l-1)}}^{(l-1)} + b_2^{(l)} \\ &\vdots \\ z_{N^{(l)}}^{(l)} &= w_{N^{(l)}1}^{(l)} a_1^{(l-1)} + w_{N^{(l)}2}^{(l)} a_2^{(l-1)} + \cdots + w_{N^{(l)}N^{(l-1)}}^{(l)} a_{N^{(l-1)}}^{(l-1)} + b_{N^{(l)}}^{(l)} \end{cases}$$

写成矩阵乘法的形式

$$\begin{bmatrix} z_1^{(l)} \\ z_2^{(l)} \\ \vdots \\ z_{N^{(l)}}^{(l)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} w_{11}^{(l)} & w_{12}^{(l)} & \cdots & w_{1N^{(l-1)}}^{(l)} \\ w_{21}^{(l)} & w_{22}^{(l)} & \cdots & w_{2N^{(l-1)}}^{(l)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ w_{N^{(l)}1}^{(l)} & w_{N^{(l)}2}^{(l)} & \cdots & w_{N^{(l)}N^{(l-1)}}^{(l)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1^{(l-1)} \\ a_2^{(l-1)} \\ \vdots \\ a_{N^{(l-1)}}^{(l-1)} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} b_1^{(l)} \\ b_2^{(l)} \\ \vdots \\ b_{N^{(l)}}^{(l)} \end{bmatrix}$$

即

$$\boldsymbol{z}^{(l)}=\boldsymbol{w}^{(l)}\boldsymbol{a}^{(l-1)}+\boldsymbol{b}^{(l)}$$

由于 $\boldsymbol{a}^{(l)}=\sigma(\boldsymbol{z}^{(l)})$ ，故有

$$\boldsymbol{a}^{(l)}=\sigma(\boldsymbol{w}^{(l)}\boldsymbol{a}^{(l-1)}+\boldsymbol{b}^{(l)})$$

其中 $\sigma(x)$ 为激活函数，常见的比如取 $\sigma(x)=\dfrac{1}{1+e^{-x}}$ 。

神经网络的损失函数

根据神经网络模型每一层的 $\boldsymbol{w}^{(l)}$ 和 $\boldsymbol{b}^{(l)}$ 可能互不相同，因此通过这样一个神经网络模型最后的输出为一个函数集合 $f(x;\theta)$

$$f(x;\theta)=\sigma(w^{(L)}\cdots\sigma(w^{(2)}\sigma(w^{(1)}x+b^{(1)})+b^{(2)})\cdots+b^{(L)})$$

其中 L 表示神经网络的输出层， $\theta=\{w^{(1)},b^{(1)},w^{(2)},b^{(2)}\cdots,w^{(L)},b^{(L)}\}$ 。假设训练数据集为($x^{(1)}$,$y^{(1)}$)，($x^{(2)}$,$y^{(2)}$)，$\cdots$，($x^{(r)}$,$y^{(r)}$)，$\cdots$，($x^{(m)}$,$y^{(m)}$)，其中$x^{(i)}\in\mathbb{R}^n$。接下来可以给出损失函数 $C(\theta)$

$$C^{(i)}(\theta)=\frac{1}{m}\sum_{r=1}^{m}\|f(x^{(r)};\theta)-y^{(r)}\|$$

$$C(\theta)=\frac{1}{N^{(L)}}\sum_{i=1}^{N^{(L)}}C^{(i)}(\theta)$$

对于上述损失函数如果直接用梯度下降算法求解的话是不可行的。

损失函数在输出层的误差

根据误差传播的传递性 $\Delta z_j^{(L)}\to\Delta a_j^{(L)}\to\Delta C(\theta)$ 并结合链式求导法则可以求得损失函数在输出层神经元上的误差 $\delta_j^{(L)}$ 。

$$\begin{aligned}\delta_j^{(L)}&=\frac{\partial C(\theta)}{\partial z_j^{(L)}}=\frac{\partial C(\theta)}{\partial a_j^{(L)}}\frac{\partial a_j^{(L)}}{\partial z_j^{(L)}}\\&=\frac{\partial C(\theta)}{\partial a_j^{(L)}}\frac{\partial\sigma(z_j^{(L)})}{\partial z_j^{(L)}}\\&=\frac{\partial C(\theta)}{\partial a_j^{(L)}}\sigma'(z_j^{(L)})\end{aligned}$$

对于输出层上的所有神经元，则可表示为向量形式

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{\delta}^{\boldsymbol{L}} = \begin{bmatrix} \delta_1^{(L)} \\ \delta_2^{(L)} \\ \vdots \\ \delta_{N^{(L)}}^{(L)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial C(\theta)}{\partial a_1^{(L)}} \sigma'(z_1^{(L)}) \\ \frac{\partial C(\theta)}{\partial a_2^{(L)}} \sigma'(z_2^{(L)}) \\ \vdots \\ \frac{\partial C(\theta)}{\partial a_{N^L}^{(L)}} \sigma'(z_{N^L}^{(L)}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial C(\theta)}{\partial a_1^{(L)}} \\ \frac{\partial C(\theta)}{\partial a_2^{(L)}} \\ \vdots \\ \frac{\partial C(\theta)}{\partial a_{N^L}^{(L)}} \end{bmatrix} \odot \begin{bmatrix} \sigma'(z_1^{(L)}) \\ \sigma'(z_2^{(L)}) \\ \vdots \\ \sigma'(z_{N^L}^{(L)}) \end{bmatrix} \\
= \nabla_{\boldsymbol{a}^{(L)}} C(\theta) \odot \sigma'(\boldsymbol{z}^{(\boldsymbol{L})})
\end{aligned}
$$

其中 $\odot$ 为Hadamard积，即两个矩阵对应元素的乘积 。

损失函数在隐藏层的误差

因为上面已经求出了输出层的误差，根据误差反向传播的原理，当前层的误差可理解为上一层所有神经元误差的复合函数，即使用上一层的误差来表示当前层误差，并依次递推。

$$
\begin{aligned}
\delta_j^{(l)} &= \frac{\partial C(\theta)}{\partial z_j^{(l)}} & (1) \\
&= \sum_{k=1}^{N^{(l+1)}} \frac{\partial C(\theta)}{\partial z_k^{(l+1)}} \frac{\partial z_k^{(l+1)}}{\partial a_j^{(l)}} \frac{\partial a_j^{(l)}}{\partial z_j^{(l)}} & (2) \\
&= \sum_{k=1}^{N^{(l+1)}} \delta_k^{(l+1)} \frac{\partial \left(\sum_{s=1}^{N^{(l)}} w_{ks}^{(l+1)} a_s^{(l)} + b_k^{(l+1)} \right)}{\partial a_j^{(l)}} \frac{\partial a_j^{(l)}}{\partial z_j^{(l)}} & (3) \\
&= \sum_{k=1}^{N^{(l+1)}} \delta_k^{(l+1)} w_{kj}^{(l+1)} \sigma'(z_j^{(l)}) & (4)
\end{aligned}
$$

从 (1) 式到 (2) 式可理解为当前层的误差是由其后一层各个神经元的误差传播而来，即当前层神经元的误差是后一层各个神经元误差的复合函数，按照多元复合函数求导的链式法则可得 (2) 式； (2) 式到 (3) 式首先利用了误差的定义其次根据 $z_k^{(l+1)}$ 的定义对其进行展开； (3) 式到 (4) 式较为简单直接利用了偏导数的求导法则。

同理对于隐藏层所有神经元的误差，可写成向量形式

$$
\boldsymbol{\delta}^{(l)} = \begin{bmatrix} \delta_1^{(l)} \\ \delta_2^{(l)} \\ \vdots \\ \delta_{N^{(l)}}^{(l)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{k=1}^{N^{(l+1)}} \delta_k^{(l+1)} w_{k1}^{(l+1)} \sigma'(z_1^{(l)}) \\ \sum_{k=1}^{N^{(l+1)}} \delta_k^{(l+1)} w_{k2}^{(l+1)} \sigma'(z_2^{(l)}) \\ \vdots \\ \sum_{k=1}^{N^{(l+1)}} \delta_k^{(l+1)} w_{kN^{(l)}}^{(l+1)} \sigma'(z_{N^{(l)}}^{(l)}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{k=1}^{N^{(l+1)}} \delta_k^{(l+1)} w_{k1}^{(l+1)} \\ \sum_{k=1}^{N^{(l+1)}} \delta_k^{(l+1)} w_{k2}^{(l+1)} \\ \vdots \\ \sum_{k=1}^{N^{(l+1)}} \delta_k^{(l+1)} w_{kN^{(l)}}^{(l+1)} \end{bmatrix} \odot \begin{bmatrix} \sigma'(z_1^{(l)}) \\ \sigma'(z_2^{(l)}) \\ \vdots \\ \sigma'(z_{N^{(l)}}^{(l)}) \end{bmatrix}
$$

$$
= (\boldsymbol{w}^{(l+1)})^T \boldsymbol{\delta}^{(l+1)} \odot \sigma'(\boldsymbol{z}^{(l)})
$$

损失函数对权重矩阵 w 的偏导数

根据误差传播的传递性 $\Delta w_{jk}^{(l)} \rightarrow \Delta z_j^{(l)} \rightarrow \cdots \rightarrow \Delta C(\theta)$，因此损失函数可以看成是权重 w 的复合函数，由链式求导法则可知

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial C(\theta)}{\partial w_{jk}^{(l)}} &= \frac{\partial C(\theta)}{\partial z_j^{(l)}} \frac{\partial z_j^{(l)}}{\partial w_{jk}^{(l)}} \\
&= \delta_j^{(l)} \frac{\partial \left(\sum_{s=1}^{N^{(l-1)}} w_{js}^{(l)} a_s^{(l-1)} + b_s^{(l)} \right)}{\partial w_{jk}^{(l)}} \\
&= \delta_j^{(l)} a_k^{(l-1)}
\end{aligned}
$$

这个公式表明损失函数 $C(\theta)$ 对权重 $w_{jk}^{(l)}$ 的梯度其实就等于第 l 层第 j 个神经元的误差乘以 $l-1$ 层第 k 个神经元的输出，可以发现当激活函数的输出值 a 很小的时候那么相应的梯度也会变得非常小，因此依赖于梯度下降算法来更新权重 w_{jk} 将会变得非常缓慢，换句话说就是**当某个权重 w_{jk} 连接的上一个激活函数输出值 a 很小的话，那么这个权重 w_{jk} 的学习将会很慢。**

损失函数对偏置 b 的偏导数

同理根据误差传播的传递性 $\Delta b_j^{(l)} \rightarrow \Delta z_j^{(l)} \rightarrow \cdots \rightarrow \Delta C(\theta)$，因此损失函数也可以看成是偏置 b 的复合函数，由链式求导法则可知

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial C(\theta)}{\partial b_j^{(l)}} &= \frac{\partial C(\theta)}{\partial z_j^{(l)}} \frac{\partial z_j^{(l)}}{\partial b_j^{(l)}} \\
&= \delta_j^{(l)} \cdot 1 \\
&= \delta_j^{(l)}
\end{aligned}
$$

由这个公式可知，损失函数 $C(\theta)$ 对于偏置 $b_j^{(l)}$ 的偏导数会等于损失函数 $C(\theta)$ 在这个神经元上面的误差。如果要求梯度的话就需要求出这些偏导数，但现在通过误差却间接得到了偏导数。

反向传播算法流程总结

(step1) 训练数据输入

假设训练数据集为($x^{(1)}$,$y^{(1)}$)，($x^{(2)}$,$y^{(2)}$)，$\cdots$，($x^{(r)}$,$y^{(r)}$)，$\cdots$，($x^{(m)}$,$y^{(m)}$)，其中 $x^{(i)} \in \mathbb{R}^n$，并为输入层选择合适的激活函数 $\sigma(x)$ 。

(step2) 前向传播过程

对于神经网络的各层前向的计算一遍结果， $l=2,3,\cdots,L$ 。

$$\begin{cases} \boldsymbol{z}^{(l)} = \boldsymbol{w}^{(l)} \boldsymbol{a}^{(l-1)} + \boldsymbol{b} \\ \boldsymbol{a}^{(l)} = \sigma'(\boldsymbol{z}^{(l)}) \end{cases}$$

(step3) 计算输出层误差

$$\boldsymbol{\delta}^{(L)} = \nabla_{\boldsymbol{a}^{(L)}} \boldsymbol{C(\theta)} \odot \boldsymbol{z}^{(L)}$$

(step4) 计算反向传播误差

对于神经网络的各层从后向前计算一遍结果， $l=L-1,L-2,\cdots,2$ 。

$$\boldsymbol{\delta}^{(l)} = \left((\boldsymbol{w}^{(l)})^T \boldsymbol{\delta}^{(l+1)} \right) \odot \sigma(\boldsymbol{z}^{(l)})$$

(step5) 计算并且更新权重 w 和偏置 b

通过梯度下降算法更新权重 w 和偏置 b 的值， α 为学习率其中 $\alpha \in (0,1]$ 。

$$\begin{cases} w_{jk}^{(l)} := w_{jk}^{(l)} - \alpha \dfrac{\partial C(\theta)}{\partial w_{jk}^{(l)}} \\ b_j^{(l)} := b_j^{(l)} - \alpha \dfrac{\partial C(\theta)}{\partial b_j^{(l)}} \end{cases}$$

即

$$\begin{cases} w_{jk}^{(l)} := w_{jk}^{(l)} - \alpha a_k^{(l-1)} \delta_j^{(l)} \\ b_j^{(l)} := b_j^{(l)} - \alpha \delta_j^{(l)} \end{cases}$$