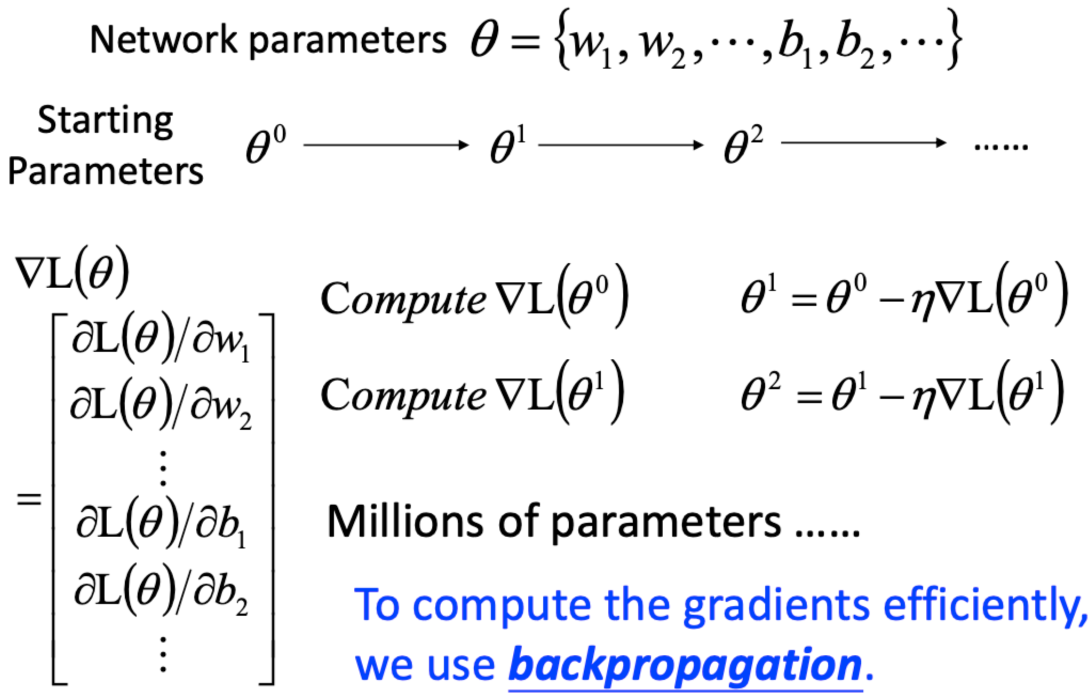
Gradient Descent

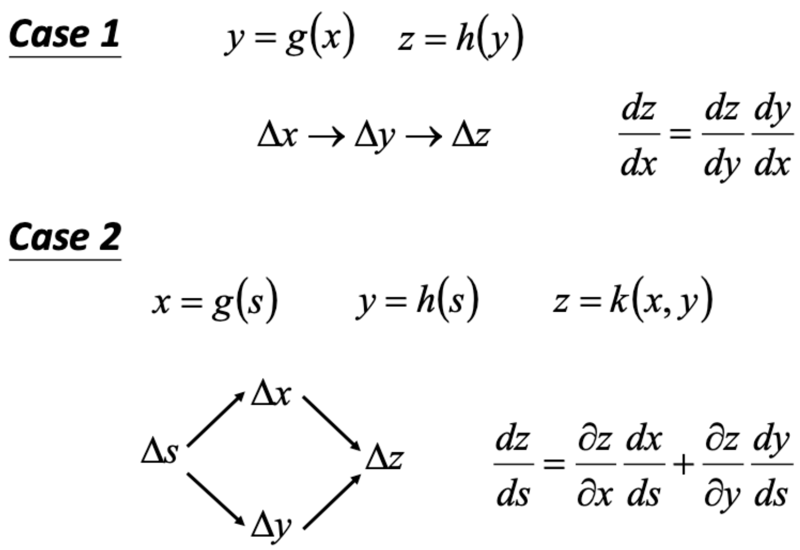
这里我们再回顾一下gradient descent，对于网络中的参数$w_1, w_2, ..., b_1, b_2, ...$，通过求出相对应的梯度$\Delta L(\theta)$，再根据梯度更新网络结构中的参数

$$\theta^i = \theta^{i-1} - \eta \Delta L(\theta^{i-1})$$



Chain Rule

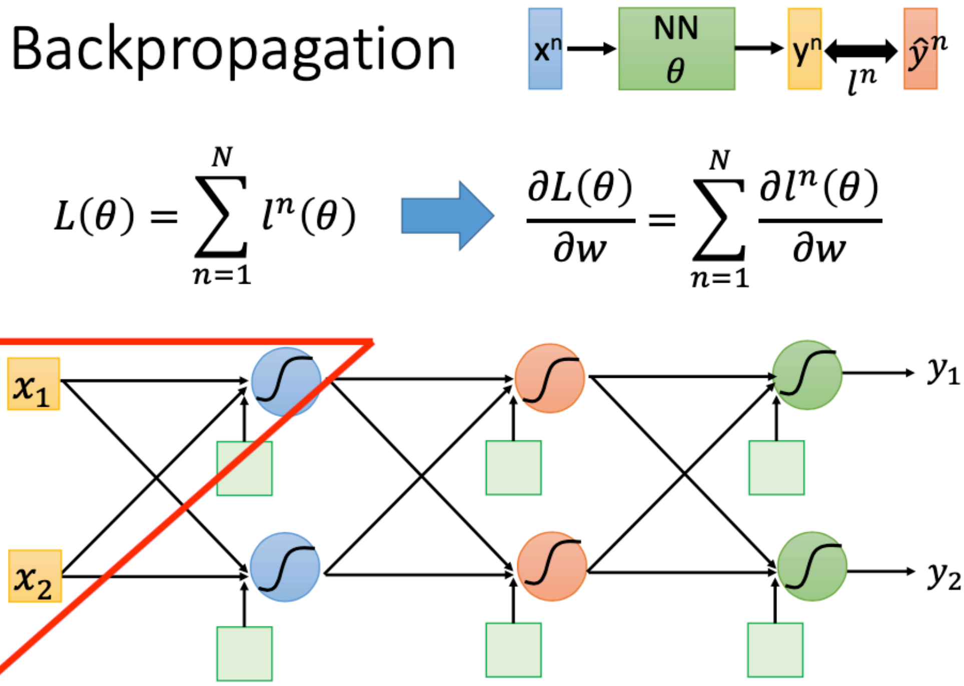
backpropagation的核心思想就是链式法则



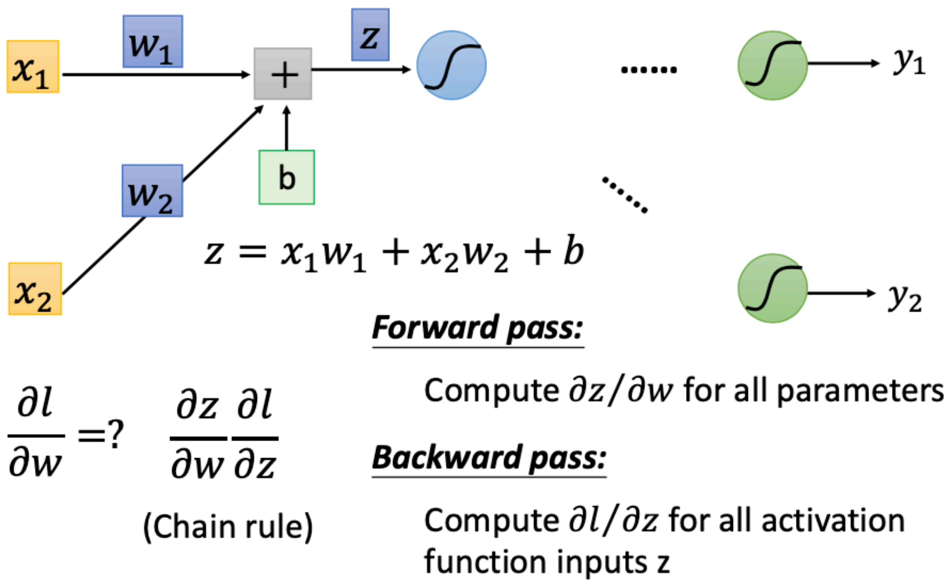
Backpropagation

这里我们先定义了一个loss函数，$l^n(\theta)$表示training data中y^n和$\hat{y}^n$之间的loss，这个loss可以通过cross entropy或者MSE计算，再将所有的loss进行求和，得到$L(\theta)$

$$L(\theta)=\sum_{n=1}^{N} l^n(\theta)$$



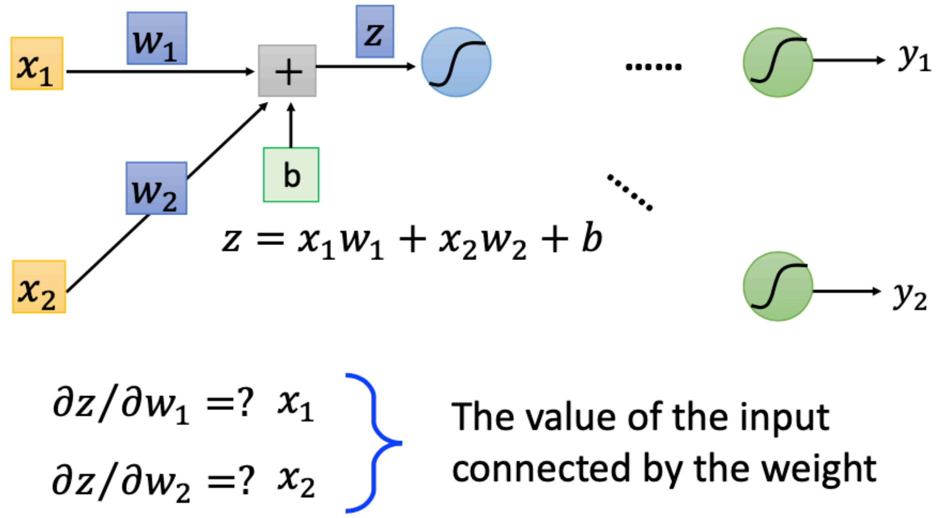
对w求导，可得$\frac{\partial l^n}{\partial w}=\frac{\partial z}{\partial w}\frac{\partial l}{\partial z}$，这里我们截取了网络中的部分结构，神经网络的forward过程计算$\frac{\partial z}{\partial w}$，backward过程计算$\frac{\partial l}{\partial z}$



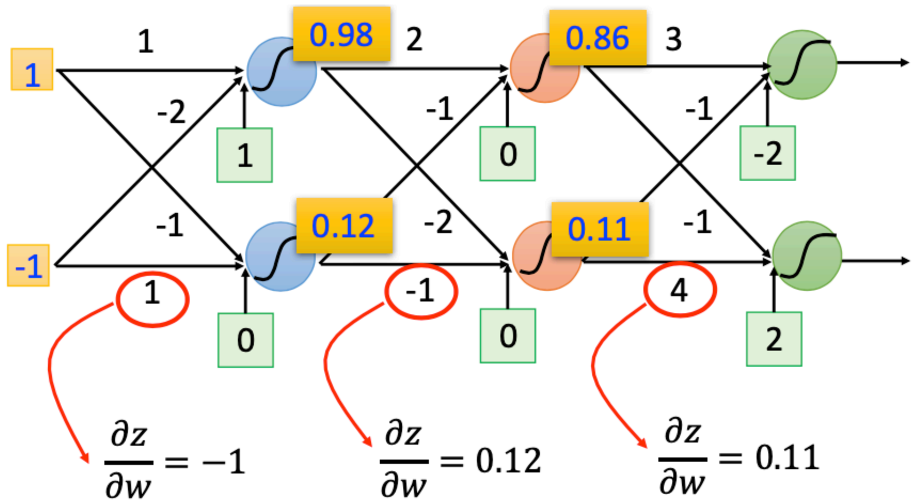
Forward pass

forward过程计算$\frac{\partial z}{\partial w}$，即为权重所对应的上一层神经元的值(x1,x2)

$$z=x_1w_1+x_2+w_2+b$$
$$\frac{\partial z}{\partial w_1}=x_1,\quad \frac{\partial z}{\partial w_2}=x_2$$



对于forward过程，计算出上层神经元的值后，才可以继续计算下一层神经元的梯度$\frac{\partial z}{\partial w}$，



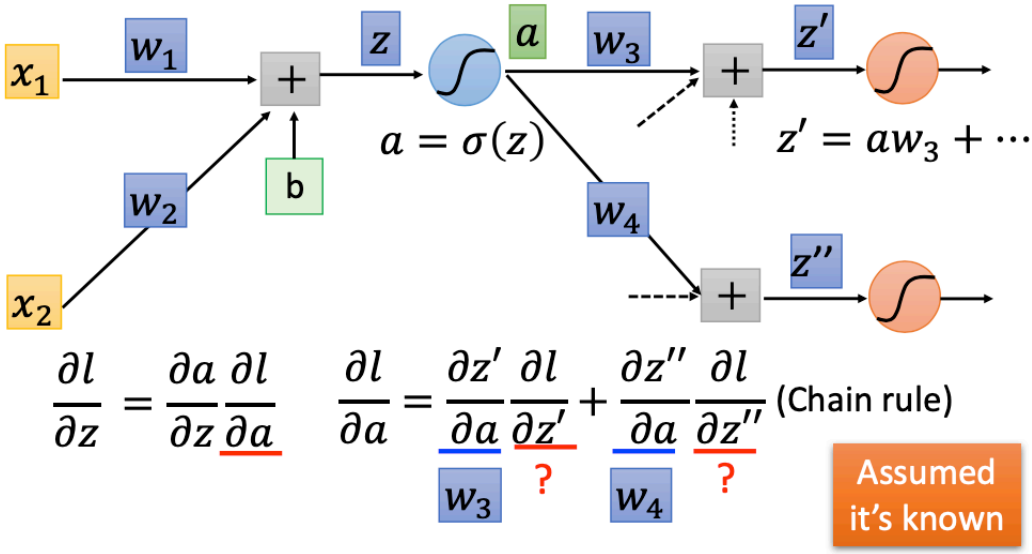
Backward pass

公式推导

backward过程计算$\frac{\partial l}{\partial z}$，z为激活函数$\sigma(z)$的输入值。这里我们令$a=\sigma(z)$，简化表达式的形式，根据chain rule

$$\frac{\partial l}{\partial z}=\frac{\partial a}{\partial z}\frac{\partial l}{\partial a}$$

其中$\frac{\partial a}{\partial z}=\sigma'(z)$，对激活函数求一阶导数，可以很轻松地表示出来



接下来我们开始$\frac{\partial l}{\partial a}$的计算，a会影响$z', z''$，因此可以再次使用链式法则

$$\frac{\partial l}{\partial a} = \frac{\partial z'}{\partial a}\frac{\partial l}{\partial z'} + \frac{\partial z''}{\partial a}\frac{\partial l}{\partial z''}$$

由于$z' = aw_3 + \ldots, \quad z'' = aw_4 + \ldots$，那么我们可以得出

$$\frac{\partial z'}{\partial a} = w_3, \quad \frac{\partial z''}{\partial a} = w_4$$

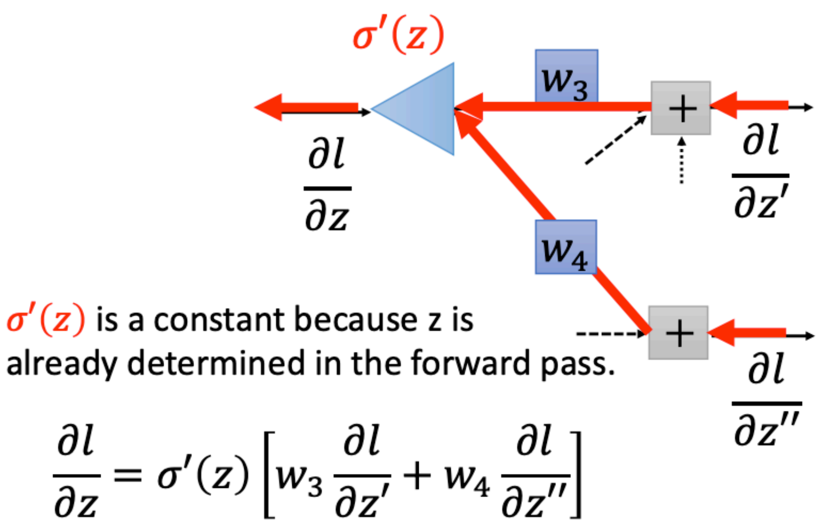
代入原式，可得

$$\frac{\partial l}{\partial z} = \frac{\partial a}{\partial z}\frac{\partial l}{\partial a} = \sigma'(z)\left[w_3\frac{\partial l}{\partial z'} + w_4\frac{\partial l}{\partial z''}\right]$$

对于$\frac{\partial l}{\partial z'}, \frac{\partial l}{\partial z''}$，我们假设可以通过某种方式求得他们的值

另一个观点

我们可以从这个图中更加直观地了解backpropagation的过程，这里我们假设有一个神经元（图中的三角形），它不在原来的网络结构中，可以通过$w_3\frac{\partial l}{\partial z'} + w_4\frac{\partial l}{\partial z''}$来计算，前面再乘上一个放大系数$\sigma'(z)$，这个放大系数的值是根据forward过程计算的，是一个常数，就可以得出$\frac{\partial l}{\partial z}$的值



两种情况

公式内的其他项都已经计算出来，还有 $\frac{\partial l}{\partial z'}$，$\frac{\partial l}{\partial z''}$ 没有得出具体的表达式，此步骤是为了求解 $\frac{\partial l}{\partial z'}$，$\frac{\partial l}{\partial z''}$ 的表达式

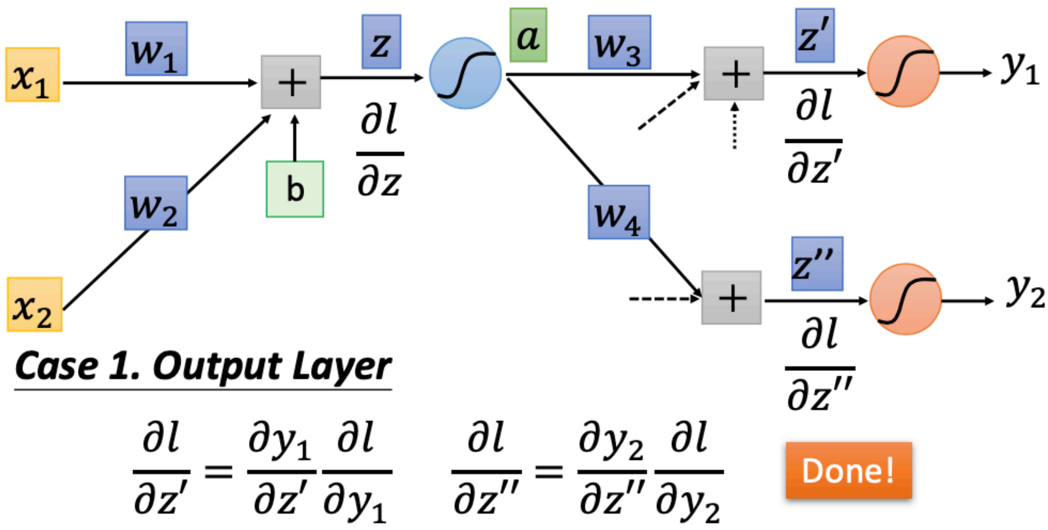
Case1：Output Layer

为了求出 $\frac{\partial l}{\partial z'}$，$\frac{\partial l}{\partial z''}$，这里再次使用了chain rule

$$\frac{\partial l}{\partial z'} = \frac{\partial y_1}{\partial z'} \frac{\partial l}{\partial y_1}$$

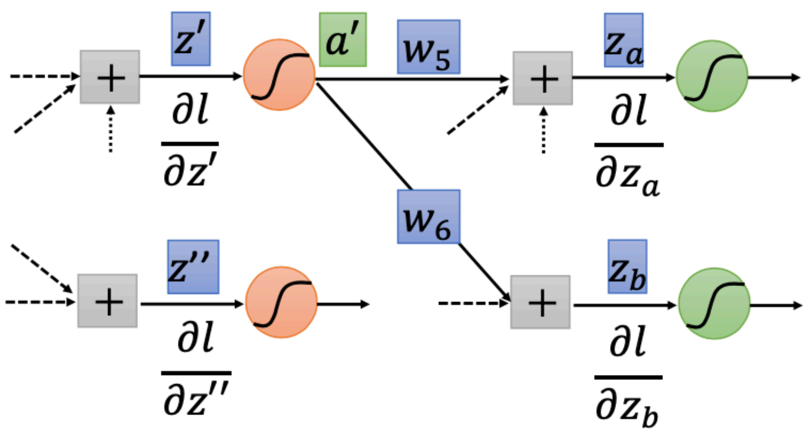
其中 $\frac{\partial y_1}{\partial z'}$ 就是激活函数的输出值再对 z' 求导；

$\frac{\partial l}{\partial y_1}$ 为相对应的loss函数对y1求导，这个loss函数可以是cross entropy，也可以是MSE，对于不同的loss函数，计算出来的导数也不同



Case2: Not output layer

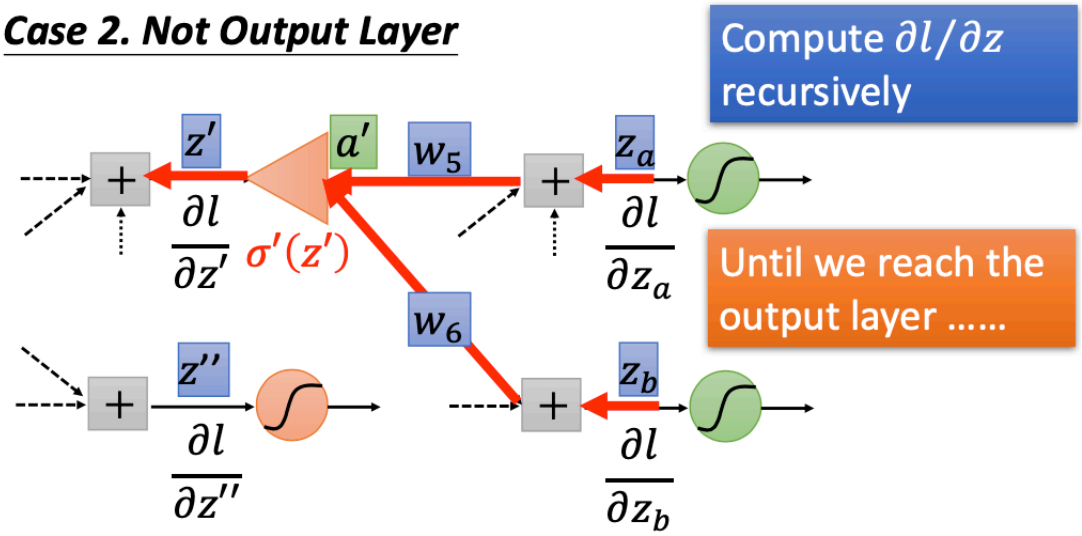
如果现在假设后层不是output layer，而是hidden layer中的其中一层，计算方式就发生了一些小小的变化



根据Case1的推导，知道了 $\frac{\partial l}{\partial z'}$，$\frac{\partial l}{\partial z''}$ 之后，就可以对 $\frac{\partial l}{\partial z'}$ 进行求解

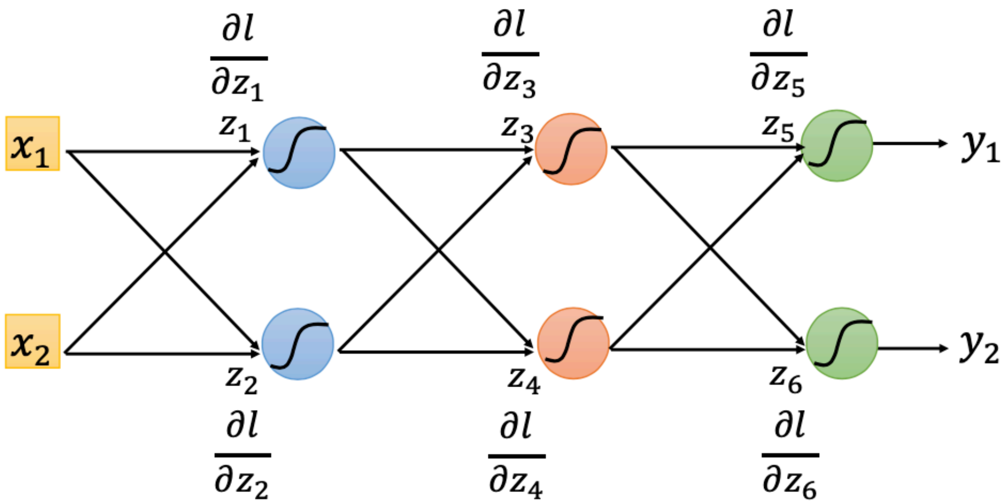
同理可得，知道了 $\frac{\partial l}{\partial z_a}$，$\frac{\partial l}{\partial z_b}$，就可以对 $\frac{\partial l}{\partial z'}$ 求解，如下图所示，$\frac{\partial l}{\partial z_a}$，$\frac{\partial l}{\partial z_b}$ 分别乘上对应的权重 w_5, w_6，前面再乘一个放大系数，就可得出 $\frac{\partial l}{\partial z'}$ 的表达式

$$\frac{\partial l}{\partial z'}=\sigma'(z')\left[w_5\frac{\partial l}{\partial z_a}+w_6\frac{\partial l}{\partial z_b}\right]$$

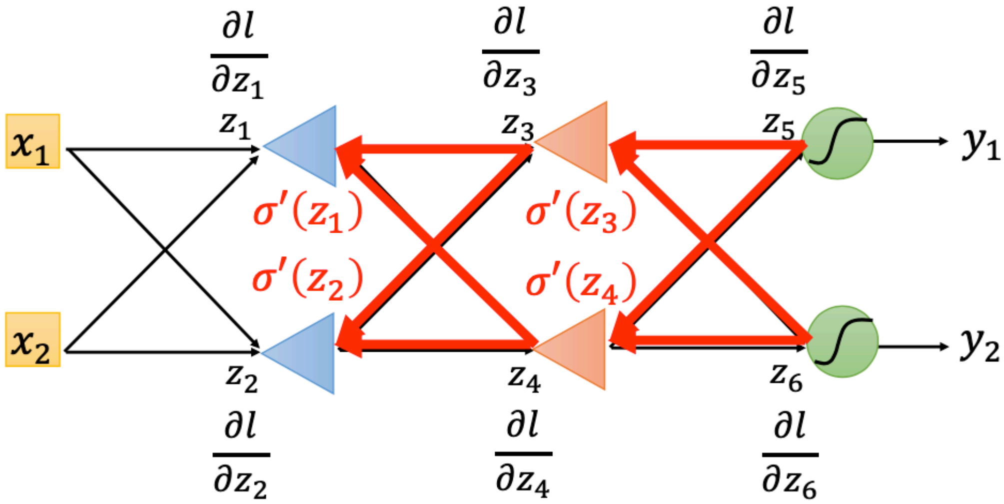


知道了z', z''的值后，就可以根据公式计算z的值；知道了z_a, z_b之后，就可以计算z' 的值；……一直循环这个步骤，直到到达output layer为止

下图中有6个neural，分别是$z_1, z_2, z_3, z_4, z_5, z_6$，为激活函数的输入值，现在要分别求得$l$对这些函数的偏微分$\frac{\partial l}{\partial z_i}$。按照我们之前的做法，要求$\frac{\partial l}{\partial z_1}$，就必须要求$\frac{\partial l}{\partial z_3}$，$\frac{\partial l}{\partial z_4}$，而要求$\frac{\partial l}{\partial z_3}$，$\frac{\partial l}{\partial z_4}$的值，就必须要分别求两次$\frac{\partial l}{\partial z_5}$，$\frac{\partial l}{\partial z_6}$的值，计算效率很低



如果我们先计算$\frac{\partial l}{\partial z_5}$，$\frac{\partial l}{\partial z_6}$，就可以接着计算出$\frac{\partial l}{\partial z_3}$，$\frac{\partial l}{\partial z_4}$的值，再计算出$\frac{\partial l}{\partial z_1}$，$\frac{\partial l}{\partial z_2}$的值，计算效率可以提高很多



Summary

神经网络的forward过程计算$\frac{\partial z}{\partial w}$，backward过程计算$\frac{\partial l}{\partial z}$，再相乘，就可以得出loss函数对每个hidden layer神经元的梯度，

$$\frac{\partial l}{\partial w} = \frac{\partial z}{\partial w}\frac{\partial l}{\partial z}$$

代入每次参数更新的公式，就可以得出每次的参数更新结果

$$w^i = w^{i-1} - \eta\Delta L(w^{i-1})$$