BP神经网络

1.激活函数

激活函数(Activation Function)是在人工神经网络的神经元上运行的函数,负责将神经元的输入映射到输出端。激活函数对于人工神经网络模型去学习、理解复杂的非线性函数,具有十分重要的作用。

如果不使用激活函数,每一层输出都是上一层输入的线性运算,无论神经网络有多少层,最终的输出只是输入的线性组合,相当于感知机。如果使用了激活函数,将非线性因素引入到网络中,使得神经网络可以任意逼近任何非线性函数,能够应用到更多的非线性模型。

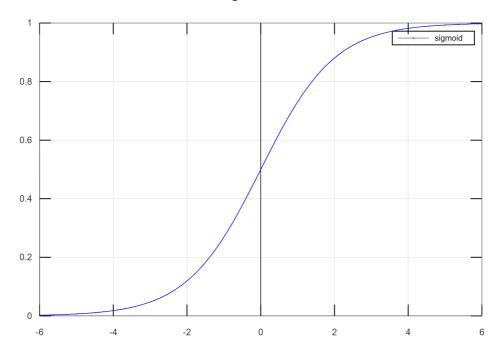
常用的激活函数

sigmoid 函数

Sigmoid函数是一个在生物学中常见的S型函数,也称为S型生长曲线。在信息科学中,由于其单增以及反函数单增等性质,Sigmoid函数常被用作神经网络的阈值函数,将变量映射到0,1之间,公式如下:

$$f(x) = \frac{1}{1+e^{(-x)}}$$

sigmoid函数

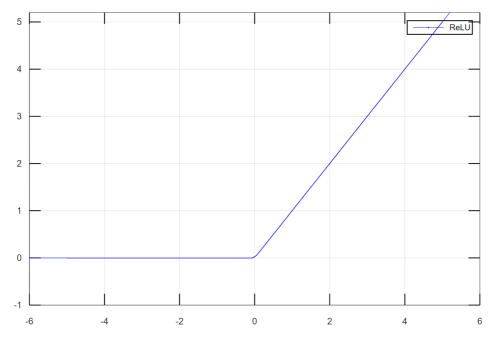


ReLU函数

Relu激活函数(The Rectified Linear Unit),用于隐藏层的神经元输出。公式如下:

$$f(x) = max(0, x)$$

ReLU函数



Tanh 函数

Tanh 是双曲函数中的一个,Tanh() 为双曲正切。在数学中,双曲正切"Tanh"是由基本双曲函数双曲正弦和双曲余弦推导而来。公式如下:

$$f(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}}$$

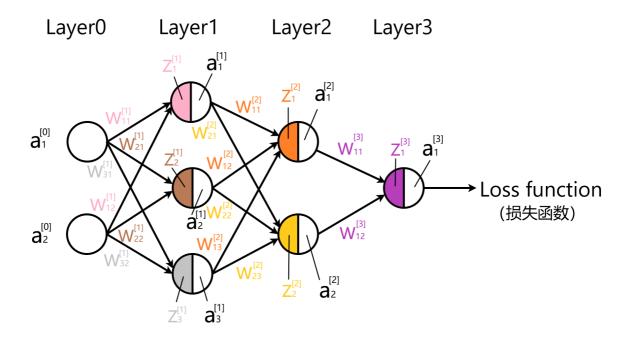
softmax 函数

softmax 函数用于输出层。假设输出层共有 n 个神经元,计算第 k 个神经元的输出 y_k 。 softmax 函数的分子是输入信号 a_k 的指数函数,分母是所有输入信号的指数函数的和。softmax 函数公式如下:

$$y_k = rac{e^{a_k}}{\sum_{i=1}^n e^{a_i}}$$

2.神经网络结构

第0层是输入层(2个神经元),第1层是隐含层(3个神经元),第2层是隐含层(2个神经元),第 3层是输出层。



符号约定

 $w_{jk}^{[l]}$ 表示从网络第 $(l-1)^{th}$ 层第 k^{th} 个神经元指向第 l^{th} 层第 j^{th} 个神经元的连接权重,同时也是第 l 层权重矩阵第 j 行第 k 列的元素。例如,上图中 $w_{21}^{[1]}$,第0层第1个神经元指向第1层第2个神经元的权重(褐色),也就是第 1 层权重矩阵第 2 行第 1 列的元素。同理,使用 $b_j^{[l]}$ 表示第 l^{th} 层第 j^{th} 个神经元的偏置,同时也是第 l 层偏置向量的第 j 个元素。使用 $z_j^{[l]}$ 表示第 l^{th} 层第 j^{th} 个神经元的线性结果,使用 $a_j^{[l]}$ 来表示第 l^{th} 层第 j^{th} 个神经元的激活函数输出。其中,激活函数使用符号 σ 表示,第 l^{th} 层中第 j^{th} 个神经元的激活为:

$$a_{j}^{[l]} = \sigma(z_{j}^{[l]}) = \sigma\left(\sum_{k} w_{jk}^{[l]} a_{k}^{[l-1]} + b_{j}^{[l]}
ight)$$

 $w^{[l]}$ 表示第 l 层的权重矩阵, $b^{[l]}$ 表示第 l 层的偏置向量, $a^{[l]}$ 表示第 l 层的神经元向量,结合上图讲述:

$$w^{[1]} = egin{bmatrix} w^{[1]}_{11} & w^{[1]}_{12} \ w^{[1]}_{21} & w^{[1]}_{22} \ w^{[1]}_{31} & w^{[1]}_{32} \end{bmatrix} \qquad \qquad w^{[2]} = egin{bmatrix} w^{[2]}_{11} & w^{[2]}_{12} & w^{[2]}_{13} \ w^{[2]}_{21} & w^{[2]}_{22} & w^{[2]}_{23} \end{bmatrix} \ b^{[1]} = egin{bmatrix} b^{[1]}_{1} \ b^{[1]}_{2} \ b^{[1]}_{3} \end{bmatrix} \qquad \qquad b^{[2]} = egin{bmatrix} b^{[2]}_{1} \ b^{[2]}_{2} \end{bmatrix}$$

进行线性矩阵运算。

$$z^{[1]} = \begin{bmatrix} w_{11}^{[1]} & w_{12}^{[1]} \\ w_{21}^{[1]} & w_{22}^{[1]} \\ w_{31}^{[1]} & w_{32}^{[1]} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a_1^{[0]} \\ a_2^{[0]} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} b_1^{[1]} \\ b_2^{[1]} \\ b_3^{[1]} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} w_{11}^{[1]} a_1^{[0]} + w_{12}^{[1]} a_2^{[0]} + b_1^{[1]} \\ w_{21}^{[1]} a_1^{[0]} + w_{22}^{[1]} a_2^{[0]} + b_2^{[1]} \\ w_{31}^{[1]} a_1^{[0]} + w_{32}^{[1]} a_2^{[0]} + b_3^{[1]} \end{bmatrix}$$

$$z^{[2]} = \begin{bmatrix} w_{11}^{[2]} & w_{12}^{[2]} & w_{13}^{[2]} \\ w_{21}^{[2]} & w_{22}^{[2]} & w_{23}^{[2]} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a_1^{[1]} \\ a_2^{[1]} \\ a_3^{[1]} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} b_1^{[2]} \\ b_2^{[2]} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} w_{11}^{[2]} a_1^{[1]} + w_{12}^{[2]} a_2^{[1]} + w_{13}^{[2]} a_3^{[1]} + b_1^{[2]} \\ w_{21}^{[2]} a_1^{[1]} + w_{22}^{[2]} a_2^{[1]} + w_{23}^{[2]} a_3^{[1]} + b_2^{[2]} \end{bmatrix}$$
矩阵形状 (2,3) (3,1) (2,1) (2,1)

那么, 前向传播过程可以表示为:

$$a^{[l]}=\sigma\left(w^{[l]}a^{[l-1]}+b^{[l]}
ight)$$

上述讲述的前向传播过程,输入层只有1个列向量,也就是只有一个输入样本。对于多个样本,输入不再是1个列向量,而是m个列向量,每1列表示一个输入样本。m个 $a^{[l-1]}$ 列向量组成一个m列的矩阵 $A^{[l-1]}$

$$A^{[l-1]} = egin{bmatrix} | & | & \cdots & | \ a^{[l-1](1)} & a^{[l-1](2)} & \dots & a^{[l-1](m)} \ | & & \cdots & | \end{bmatrix}$$

多样本输入的前向传播过程可以表示为:

$$egin{aligned} Z^{[l]} &= w^{[l]} \cdot A^{[l-1]} + b^{[l]} \ A^{[l]} &= \sigma\left(Z^{[l]}
ight) \end{aligned}$$

与单样本输入相比,多样本 $w^{[l]}$ 和 $b^{[l]}$ 的定义是完全一样的,不同的只是 $Z^{[l]}$ 和 $A^{[l]}$ 从1列变成m列,每1列表示一个样本的计算结果。

3.损失函数

在有监督的机器学习算法中,我们希望在学习过程中最小化每个训练样例的误差。通过梯度下降等 优化策略完成的,而这个误差来自损失函数。

损失函数用于单个训练样本,而**成本函数**是多个训练样本的平均损失。优化策略旨在最小化成本函数。下面例举几个常用的损失函数。

回归问题

1. 绝对值损失函数(L_1 损失函数):

$$L(\hat{y}, y) = |y - \hat{y}|$$

y 表示真实值或期望值, \hat{y} 表示预测值

2. 平方损失函数(L_2 损失函数):

$$L(\hat{y}, y) = (y - \hat{y})^2$$

y 表示真实值或期望值, \hat{y} 表示预测值

分类问题

1. 交叉熵损失:

$$L(\hat{y}, y) = -y \log(\hat{y}) - (1 - y) \log(1 - \hat{y})$$

y 表示真实值或期望值, \hat{y} 表示预测值

4.反向传播

反向传播的基本思想:通过计算输出层与期望值之间的误差来调整网络参数,使得误差变小(最小化损失函数或成本函数)。反向传播基于**四个基础等式**,非常简洁优美,但想要理解透彻还是挺烧脑的。

求解梯度矩阵

假设函数 $f:R^{n\times 1}\to R$ 将输入的列向量(shape: $n\times 1$) 映射为一个实数。那么,函数 f 的梯度定义为:

$$abla_x f(x) = egin{bmatrix} rac{\partial f(x)}{\partial x_1} \ rac{\partial f(x)}{\partial x_2} \ dots \ rac{\partial f(x)}{\partial x_n} \end{bmatrix}$$

同理,假设函数 $f:R^{m\times n}\to R$ 将输入的矩阵(shape: $m\times n$) 映射为一个实数。函数 f 的梯度定义为:

$$abla_A f(A) = egin{bmatrix} rac{\partial f(A)}{\partial A_{11}} & rac{\partial f(A)}{\partial A_{12}} & \cdots & rac{\partial f(A)}{\partial A_{13}} \ rac{\partial f(A)}{\partial A_{21}} & rac{\partial f(A)}{\partial A_{22}} & \cdots & rac{\partial f(A)}{\partial A_{2n}} \ dots & dots &$$

可以简化为:

$$(
abla_A f(A))_{ij} = rac{\partial f(A)}{\partial A_{ij}}$$

注意:梯度求解的前提是函数 f 返回的必须是一个实数,如果函数返回的是一个矩阵或者向量,是没有办法求解梯度的。例如,函数 $f(A)=\sum_{i=0}^m\sum_{j=0}^nA_{ij}^2$,函数返回一个实数,可以求解梯度矩阵。如果 $f(x)=Ax\left(A\in R^{m\times n},x\in R^{n\times 1}\right)$,函数返回一个m行的列向量,就不能对 f 求解梯度矩阵。

矩阵相乘

矩阵
$$A=\begin{bmatrix}1&2\\3&4\end{bmatrix}$$
,矩阵 $B=\begin{bmatrix}-1&-2\\-3&-4\end{bmatrix}$
$$AB=\begin{bmatrix}1\times-1+2\times-3&1\times-2+2\times-4\\3\times-1+4\times-3&3\times-2+4\times-4\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-7&-10\\-15&-22\end{bmatrix}$$

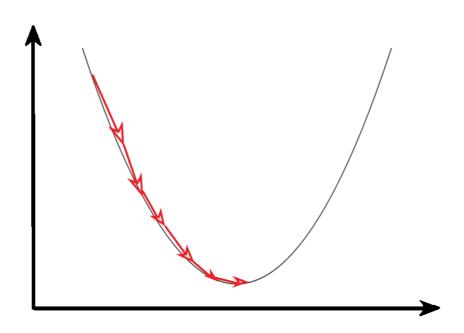
矩阵对应元素相乘

使用符号①表示:

$$A\odot B=egin{bmatrix}1 imes-1&2 imes-2\3 imes-3&4 imes-4\end{bmatrix}=egin{bmatrix}-1&-4\-9&-16\end{bmatrix}$$

梯度下降法

从几何意义,梯度矩阵代表了函数增加最快的方向,沿着梯度相反的方向可以更快找到最小值。



反向传播的过程就是利用梯度下降法原理,逐步找到成本函数的最小值,得到最终的模型参数。

反向传播公式推导 (四个基础等式)

要想最小化成本函数,需要求解神经网络中的权重 w 和偏置 b 的梯度,再用梯度下降法优化参数。求解梯度也就是计算偏导数 $\frac{\partial L(a^{[l]},y)}{\partial w_{jk}^{[l]}}$ 和 $\frac{\partial L(a^{[l]},y)}{\partial b_{j}^{[l]}}$ 。为了计算这些偏导数,引入一个中间变量 $\delta_{j}^{[l]}$,它表示网络中第 l^{th} 层第 j^{th} 个神经元的误差。反向传播能够计算出误差 $\delta_{j}^{[l]}$,再根据链式法则求出 $\frac{\partial L(a^{[l]},y)}{\partial w_{jk}^{[l]}}$ 和 $\frac{\partial L(a^{[l]},y)}{\partial b_{j}^{l}}$ 。

定义网络中第 l 层第 j 个神经元的误差为 $\delta_i^{[l]}$:

$$\delta_{j}^{[l]} = rac{\partial L\left(a^{[L]},y
ight)}{\partial z_{i}^{[l]}}$$

其中 $L(a^{[L]},y)$ 表示损失函数,y 表示真实值, $a^{[L]}$ 表示输出层的预测值。 每一层的误差向量可以表示为:

$$\delta^{[l]} = egin{bmatrix} \delta_1^{[l]} \ \delta_2^{[l]} \ dots \ \delta_n^{[l]} \end{bmatrix}$$

等式一 输出层误差

$$\delta_{j}^{[L]} = rac{\partial L}{\partial a_{i}^{[L]}} \sigma' \left(z_{j}^{[L]}
ight)$$

L表示输出层层数。以下用 ∂L 表示 $\partial L\left(a^{[L]},y\right)$

写成矩阵形式是:

$$\delta^{[L]} = egin{bmatrix} rac{\partial L}{\partial a_1^{[L]}} \ rac{\partial L}{\partial a_2^{[L]}} \ dots \ rac{\partial L}{\partial a_j^{[L]}} \end{bmatrix} \odot egin{bmatrix} \sigma'\left(z_1^{[L]}
ight) \ \sigma'\left(z_2^{[L]}
ight) \ dots \ \sigma'\left(z_j^{[L]}
ight) \end{bmatrix}$$

表示成公式:

$$\delta^{[L]} =
abla_a L \odot \sigma' \left(z^{[L]}
ight)$$

推导

计算输出层的误差 $\delta_{j}^{[L]}=rac{\partial L}{\partial z_{i}^{[L]}}$,根据链式法则

$$\delta_{j}^{[L]} = \sum_{k} rac{\partial L}{\partial a_{k}^{[L]}} rac{\partial a_{k}^{[L]}}{\partial z_{i}^{[L]}}$$

输出层不一定只有一个神经元,可能有多个神经元。成本函数是每个输出神经元的损失函数之和,每个输出神经元的误差与其它神经元没有关系,所以只有k=j的时候值不是0。

当
$$k
eq j$$
时, $rac{\partial L}{\partial z_{j}^{[L]}} = 0$,简化误差 $\delta_{j}^{[L]}$,得到

$$\delta_{j}^{[L]} = rac{\partial L}{\partial a_{i}^{[L]}} rac{\partial a_{j}^{[L]}}{\partial z_{i}^{[L]}}$$

 σ 表示激活函数,由 $a_j^{[L]}=\sigma\left(z_j^{[L]}
ight)$,计算出 $rac{\partial a_j^{[L]}}{\partial z_j^{[L]}}=\sigma'\left(z_j^{[L]}
ight)$,代入最后得到

$$\delta_{j}^{[L]} = rac{\partial L}{\partial a_{j}^{[L]}} \sigma' \left(z_{j}^{[L]}
ight)$$

等式二 隐藏层误差

$$\delta_{j}^{[l]} = \sum_{k} w_{kj}^{[l+1]} \delta_{k}^{[l+1]} \sigma' \left(z_{j}^{[l]}
ight)$$

写成矩阵形式:

$$\delta^{[l]} = \left[egin{array}{cccc} w_{11}^{[l]} & w_{12}^{[l]} & \dots & w_{1k}^{[l]} \ w_{21}^{[l]} & w_{22}^{[l]} & \dots & w_{2k}^{[l]} \ dots & dots & \ddots & dots \ w_{j1}^{[l]} & w_{j2}^{[l]} & \dots & w_{jk}^{[l]} \end{array}
ight] egin{array}{cccc} \delta_1^{[l+1]} \ \delta_2^{[l+1]} \ dots \ \delta_2^{[l+1]} \end{array}
ight] \odot egin{array}{cccc} \sigma'\left(z_1^{[l]}
ight) \ \sigma'\left(z_2^{[l]}
ight) \ dots \ \sigma'\left(z_2^{[l]}
ight) \end{array}
ight]$$

矩阵形状: (j,k) * (k,1) ⊙ (j,1) = (j,1)

权重矩阵的形状从(k,j)转置变成(j,k)。

表示成公式:

$$\delta^{[l]} = \left\lceil w^{[l+1]^T} \delta^{[l+1]}
ight
ceil \odot \sigma' \left(z^{[l]}
ight)$$

推导

$$z_{k}^{[l+1]} = \sum_{j} w_{kj}^{[l+1]} a_{j}^{[l]} + b_{k}^{[l+1]} = \sum_{j} w_{kj}^{[l+1]} \sigma\left(z_{j}^{[l]}
ight) + b_{k}^{[l+1]}$$

对 $z_i^{[l]}$ 求偏导

$$rac{\partial z_k^{[l+1]}}{\partial z_j^{[l]}} = w_{kj}^{[l+1]} \sigma' \left(z_j^{[l]}
ight)$$

根据链式法则

$$\delta_j^{[l]} = rac{\partial L}{\partial z_i^{[l]}} = rac{\partial L}{\partial z_k^{[l+1]}} rac{\partial z_k^{[l+1]}}{\partial z_i^{[l]}} = \sum_k w_{kj}^{[l+1]} \delta_k^{[l+1]} \sigma'\left(z_j^{[l]}
ight)$$

等式三 参数变化率

$$egin{align} rac{\partial L}{\partial b_{j}^{[l]}} &= \delta_{j}^{[l]} \ rac{\partial L}{\partial w_{st}^{[l]}} &= a_{k}^{[l-1]} \delta_{j}^{[l]} \ \end{aligned}$$

写成矩阵形式:

$$rac{\partial L}{\partial b^{[l]}} = egin{bmatrix} \delta_1^{[l]} \ \delta_2^{[l]} \ dots \ \delta_i^{[l]} \end{bmatrix} = \delta^{[l]}$$

矩阵形状: (j,1)

$$rac{\partial L}{\partial w^{[l]}} = egin{bmatrix} \delta_1^{[l]} \ \delta_2^{[l]} \ dots \ \delta_i^{[l]} \end{bmatrix} \left[a_1^{[l]} a_2^{[l]} \ldots a_k^{[l]}
ight]$$

矩阵形状: (j,1) * (1,k) = (j,k)

注意: $\frac{\partial L}{\partial w^{[l]}}$ 是一个dim $\left(\delta^{[l]}\right)$ 行 dim $\left(a^{[l-1]}\right)$ 列的矩阵,和 $w^{[l]}$ 的维度一致; $\frac{\partial L}{\partial b^{[l]}}$ 是一个维度为 dim $\left(\delta^{[l]}\right)$ 的列向量

表示成公式:

$$egin{aligned} rac{\partial L}{\partial b^{[l]}} &= \delta^{[l]} \ rac{\partial L}{\partial w^{[l]}} &= \delta^{[l]} a^{[l-1]T} \end{aligned}$$

推导

$$z_{j}^{[l]} = \sum_{k} w_{jk}^{[l]} a_{k}^{[l-1]} + b_{k}^{[l]}$$

L 对 $b_i^{[l]}$ 求偏导,根据链式法则得到

$$rac{\partial L}{\partial b_{j}^{[l]}} = rac{\partial L}{\partial z_{j}^{[l]}} rac{\partial z_{j}^{[l]}}{b_{j}^{[l]}} = rac{\partial L}{\partial z_{j}^{[l]}} * 1 = \delta_{j}^{[l]}$$

L 对 $w_{ik}^{[l]}$ 求偏导,根据链式法则得到

$$rac{\partial L}{\partial w_{ik}^{[l]}} = rac{\partial L}{\partial z_i^{[l]}} rac{\partial z_j^{[l]}}{w_{ik}^{[l]}} = a_k^{[l-1]} \delta_j^{[l]}$$

等式四 参数更新

根据梯度下降法原理, 朝着梯度的反方向更新参数

$$egin{aligned} b_j^{[l]} \leftarrow b_j^{[l]} - lpha rac{\partial L}{\partial b_j^{[l]}} \ w_{jk}^{[l]} \leftarrow w_{jk}^{[l]} - lpha rac{\partial L}{\partial w_{jk}^{[l]}} \end{aligned}$$

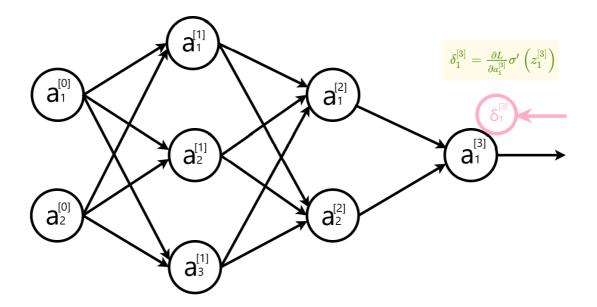
写成矩阵形式:

$$egin{aligned} b^{[l]} \leftarrow b^{[l]} - lpha rac{\partial L}{\partial b^{[l]}} \ w^{[l]} \leftarrow w^{[l]} - lpha rac{\partial L}{\partial w^{[l]}} \end{aligned}$$

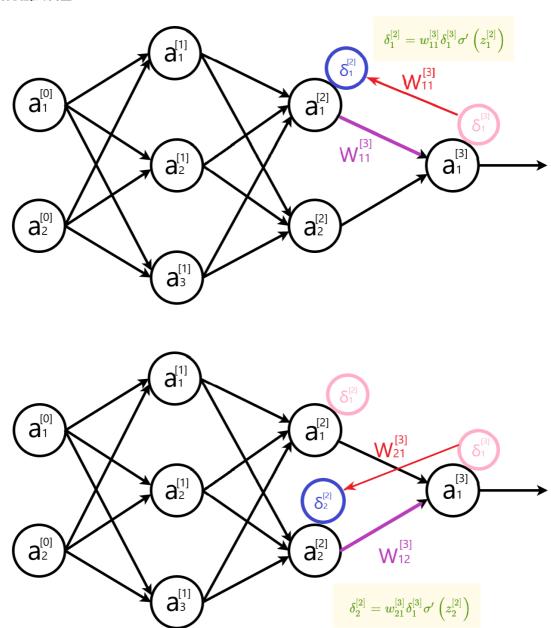
这里的 α 指的是学习率。学习率决定了反向传播过程中梯度下降的步长。

反向传播图解

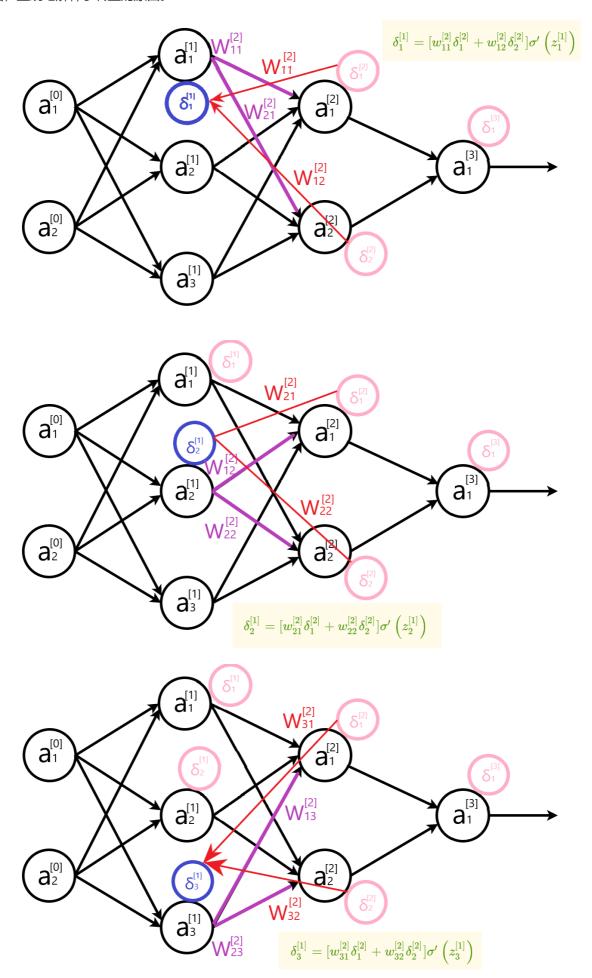
计算输出层误差

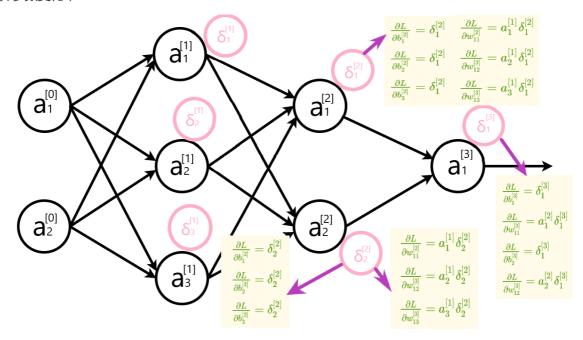


计算隐藏层误差



隐藏层误差公式写成矩阵形式 $\delta^{[l]}=\left[w^{[l+1]^T}\delta^{[l+1]}\right]\odot\sigma'\left(z^{[l]}\right)$ 时, 权重矩阵需要转置。上面两幅图,直观地解释了转置的原因。





最后更新每层的参数。

反向传播公式总结

单样本输入公式表

说明	公式
输出层误差	$\delta^{[L]} = abla_a L \odot \sigma' \left(z^{[L]} ight)$
隐含层误差	$\delta^{[l]} = \left[w^{[l+1]^T} \delta^{[l+1]} ight] \odot \sigma' \left(z^{[l]} ight)$
参数变化率	$rac{\partial L}{\partial b^{[l]}} = \delta^{[l]} \ rac{\partial L}{\partial w^{[l]}} = \delta^{[l]} a^{[l-1]T}$
参数更新	$egin{aligned} b^{[l]} \leftarrow b^{[l]} - lpha rac{\partial L}{\partial b^{[l]}} \ w^{[l]} \leftarrow w^{[l]} - lpha rac{\partial L}{\partial w^{[l]}} \end{aligned}$

多样本输入公式表

成本函数

多样本输入使用的成本函数与单样本不同。假设单样本的成本函数是交叉熵损失函数。

$$L(a, y) = -[y \cdot \log(a) + (1 - y) \cdot \log(1 - a)]$$

那么,对于m个样本输入,成本函数是每个样本的成本总和的平均值。

$$C(A,y) = -rac{1}{m}\sum_{i=0}^m \left(y^{(i)}\cdot \logig(a^{(i)}ig) + \left(1-y^{(i)}
ight)\cdot \logig(1-a^{(i)}ig)
ight)$$

误差

单样本输入的每一层的误差是一个列向量

$$\delta^{[l]} = egin{bmatrix} \delta_1^{[l]} \ \delta_2^{[l]} \ \vdots \ \delta_n^{[l]} \end{bmatrix}$$

而多样本输入的每一层的误差不再是一个列向量,变成一个m列的矩阵,每一列对应一个样本的向量。 那么多样本的误差定义为:

$$dZ^{[l]} = [\, \delta^{[l](1)} \, \delta^{[l](2)} \, \ldots \, \delta^{[l](m)} \,] = egin{bmatrix} \delta^{[l](1)}_1 & \delta^{[l](2)}_1 & \ldots & \delta^{[l](m)}_1 \ \delta^{[l](1)}_2 & \delta^{[l](2)}_2 & \ldots & \delta^{[l](m)}_2 \ dots & dots & \ddots & dots \ \delta^{[l](1)}_n & \delta^{[l](2)}_n & \ldots & \delta^{[l](m)}_n \end{bmatrix}$$

 $dZ^{[l]}$ 的维度是 $n \times m$, n 表示第 l 层神经元的个数, m 表示样本数量。

参数变换率

因为 $dZ^{[l]}$ 的维度是 j imes m , 更新 $b^{[l]}$ 的时候需要对每行求平均值,使得维度变为 j imes 1, 再乘以 $\frac{1}{m}$ 。 $dZ^{[l]}$ 的维度是 j imes m , $A^{[l-1]T}$ 的维度是 m imes k, 矩阵相乘得到的维度是 j imes k , 与 $w^{[l]}$ 本身的维度相同。因此更新 $w^{[l]}$ 时只需乘以 $\frac{1}{m}$ 求平均值。

说明	公式
输出层误差	$dZ^{[L]} = abla_A C \odot \sigma'\left(Z^{[L]} ight)$
隐含层误差	$dZ^{[l]} = \left[w^{[l+1]T}dZ^{[l+1]} ight]\odot\sigma'\left(Z^{[l)} ight]$
参数变化率	$egin{aligned} db^{[l]} &= rac{\partial C}{\partial b^{[l]}} = rac{1}{m} meanOfEachRow\left(dZ^{[l]} ight) \ dw^{[l]} &= rac{\partial C}{\partial w^{[l]}} = rac{1}{m} dZ^{[l]}A^{[l-1]T} \end{aligned}$
参数更新	$egin{aligned} b^{[l]} \leftarrow b^{[l]} - lpha rac{\partial C}{\partial b^{[l]}} \ w^{[l]} \leftarrow w^{[l]} - lpha rac{\partial C}{\partial w^{[l]}} \end{aligned}$