中国科学院大学
University of Chinese Academy of Sciences

自然语言处理
Natural Language Processing

授课教师：胡玥

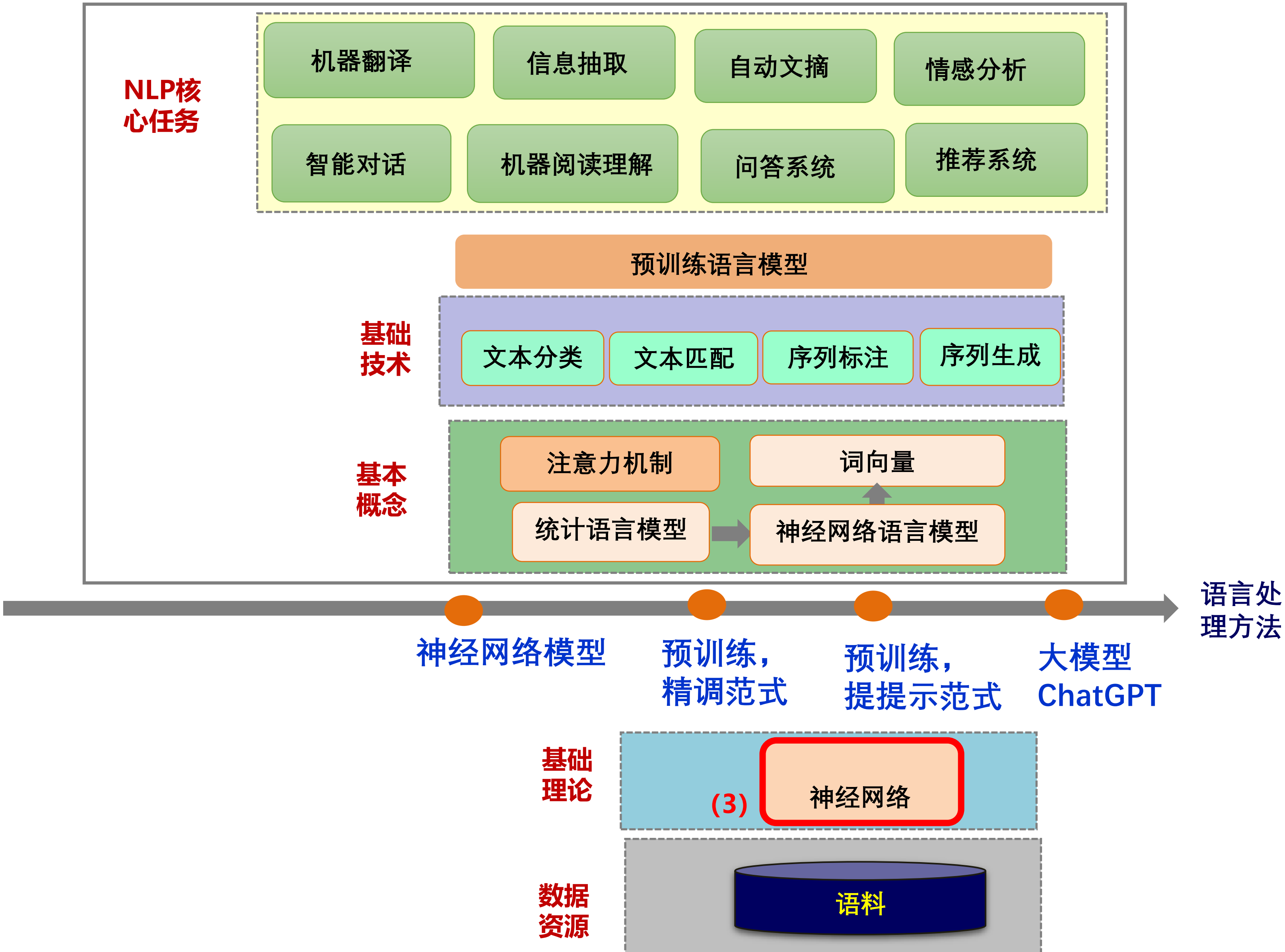
2025.09

第 3 章　深度学习基础模型

前馈神经网络

1/2

基于深度学习的自然语言处理授课体系



内 容 提 要

3.1　概述

3.2　全连接前馈神经网络 DNN

3.3　卷积神经网络 CNN

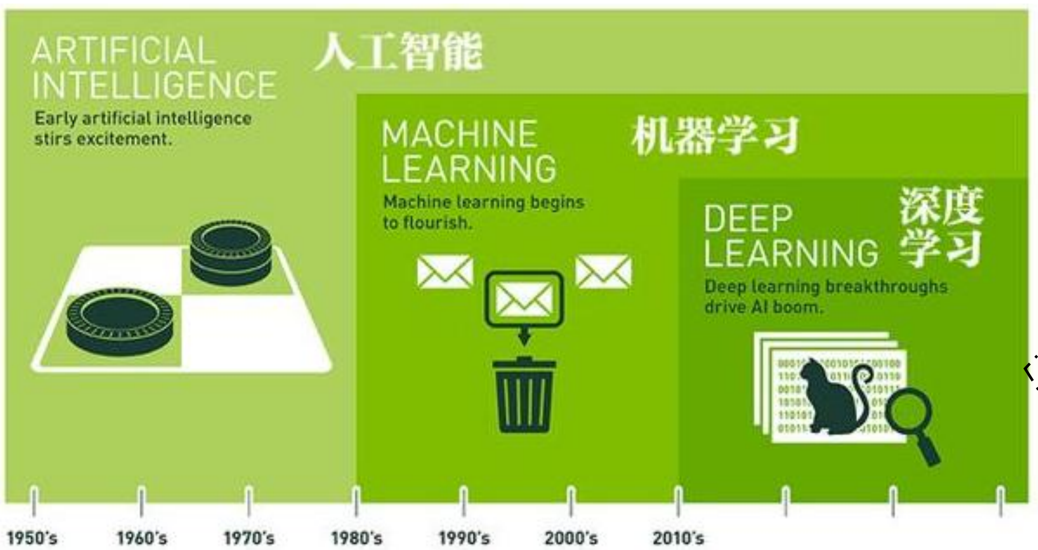
3.4　图卷积神经网络 GNN

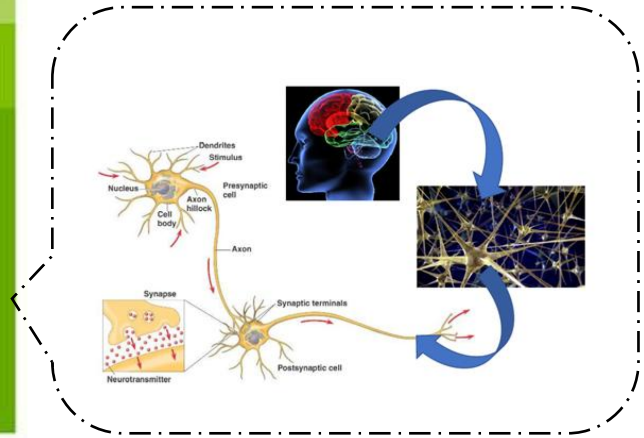
5.5　循环神经网络 RNN

3.1 概述

■ 深度学习

深度学习：机器学习的一个分支





人工神经网络：模仿人脑网络构建不同的深度学习模型

人脑结构：可视作为1000多亿神经元组成的神经网络

3.1 概述

深度学习的重量级人物（2018年图灵奖）

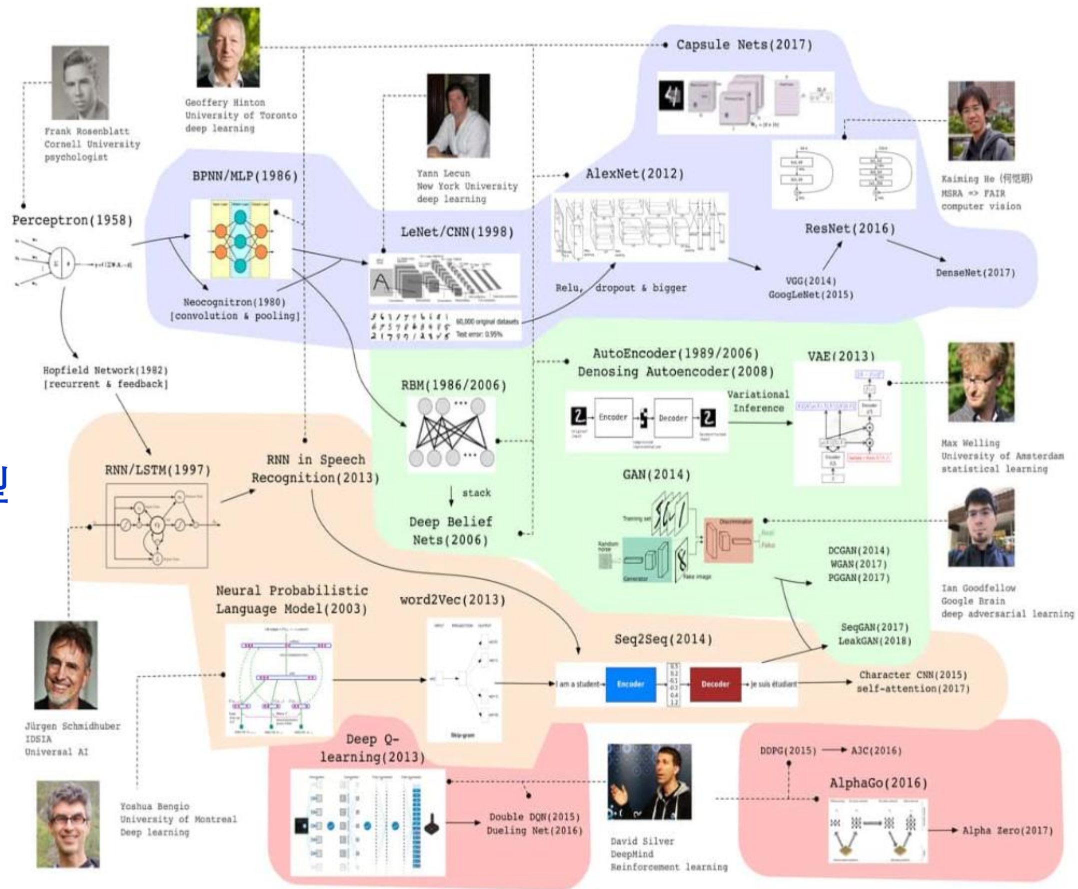
中：　Geoff Hinton，deep learning 学派创始人

右：　Yann Lecun，卷积神经网的发明者，Geoff Hinton的弟子

左：　Yoshua Bengio，蒙特利尔大学

3.1 概述

深度学习的四个主要脉络



卷积网络

无监督学习

序列深度模型

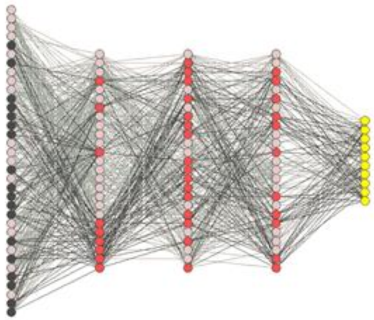
增强学习

深度学习模型最近若干年的重要进展

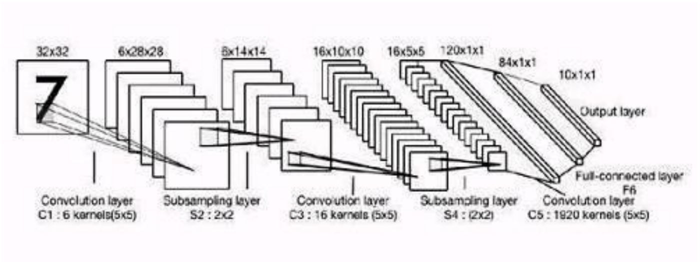
3.1 概述

■ 自然语言处理中常用的神经网络模型

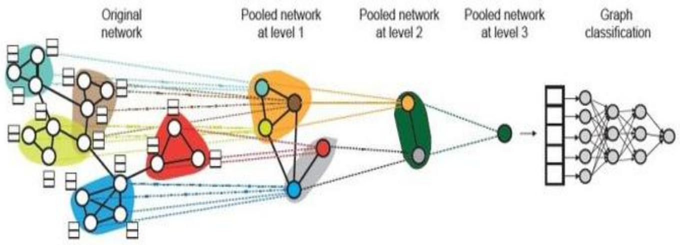
◆ 全连接前馈神经网络DNN



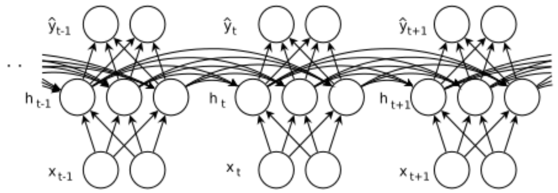
◆ 卷积神经网络CNN



◆ 图卷积神经网络GNN



◆ 循环神经网络RNN



内 容 提 要

3.1　概述

3.2　全连接前馈神经网络 DNN

3.3　卷积神经网络 CNN

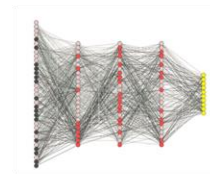
3.4　图卷积神经网络 GNN

5.5　循环神经网络 RNN

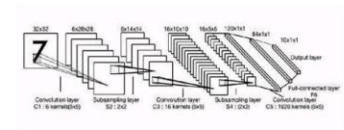
3.2 全连接前馈神经网络DNN

3.2 节内容：

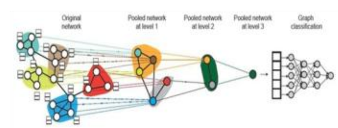
◆ 全连接前馈神经网络DNN



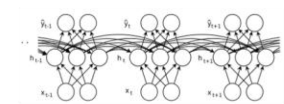
◆ 卷积神经网络CNN



◆ 图卷积神经网络GNN

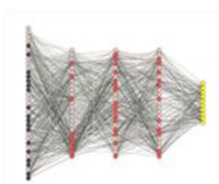


◆ 循环神经网络RNN



1. 人工神经元模型
2. 前馈神经网络DNN
3. 梯度下降法
4. 反向传播算法BP
5. 示例

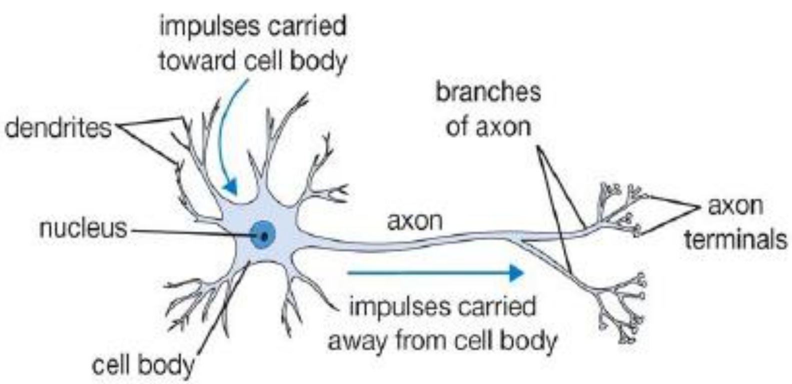
◆ 全连接前馈神经网络DNN

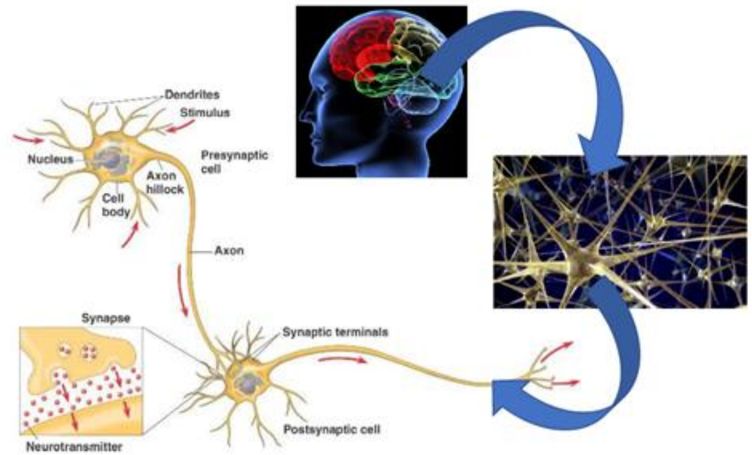


	模型结构	模型训练/学习
神经网络基础知识	人工神经元模型	梯度下降法

1. 人工神经元模型

■ 生物神经元

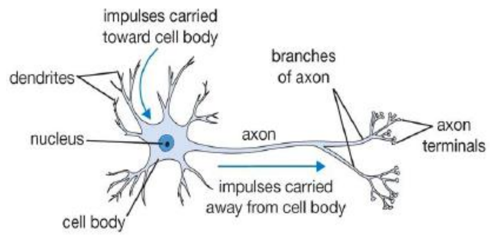


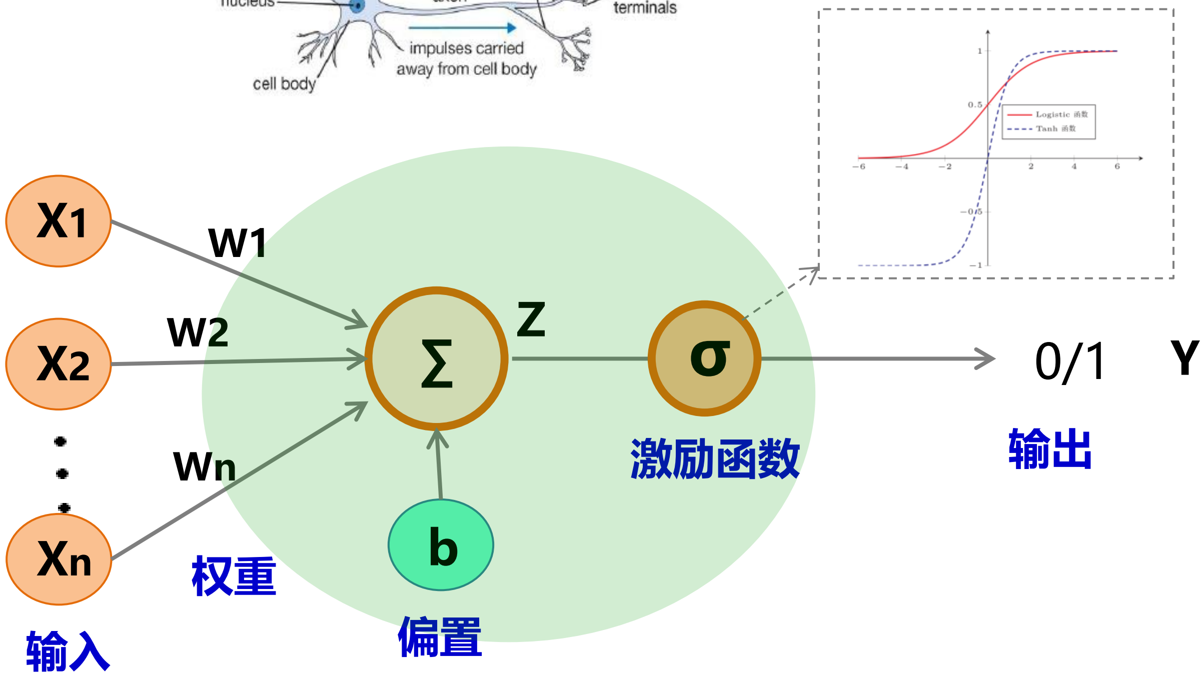


单个神经细胞只有两种状态：兴奋和抑制

1. 人工神经元模型

■ 人工神经元模型





输入: X

输出: Y

参数: w，b

函数关系：

$$Z = X1W1 + X2W2 + \cdots + XnWn + b$$

$$Y = \sigma(Z) = \sigma(W^{T}X + b)$$

1. 人工神经元模型

■ 激活函数

为了增强网络的表达能力，需要引入连续的非线性激活函数

激活函数的性质

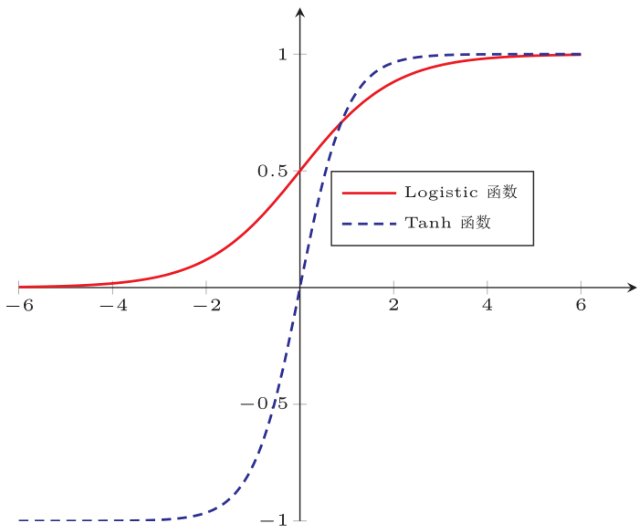
- 连续并可导（允许少数点上不可导）的非线性函数。
  - 可导的激活函数可以直接利用数值优化的方法来学习网络参数。
- 激活函数及其导函数要尽可能的简单
  - 有利于提高网络计算效率。
- 激活函数的导函数的值域要在一个合适的区间内
  - 不能太大也不能太小，否则会影响训练的效率和稳定性。

1. 人工神经元模型

常用激活函数

- $$\sigma(x) = \frac{1}{1+\exp(-x)}$$ (Sigmoid / logistic)

- $$\tanh(x) = \frac{\exp(x)-\exp(-x)}{\exp(x)+\exp(-x)}$$



- 饱和函数
- Tanh函数是零中心化的，而logistic函数的输出恒大于0

非零中心化的输出会使得其后一层的神经元的输入发生偏置偏移（bias shift），并进一步使得梯度下降的收敛速度变慢。

1. 人工神经元模型

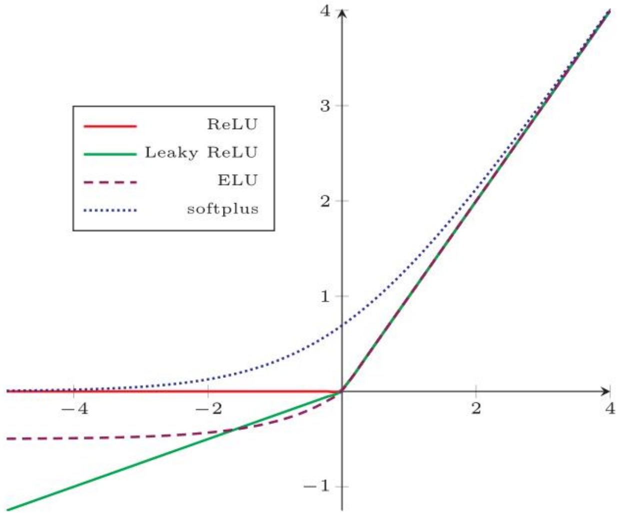
常用激活函数

- $$\mathrm{ReLU}(x) = \begin{cases} x & x \geq 0 \\ 0 & x < 0 \end{cases}$$
  $$= \max(0, x).$$

- $$\mathrm{LeakyReLU}(x) = \begin{cases} x & \text{if } x > 0 \\ \gamma x & \text{if } x \leq 0 \end{cases}$$
  $$= \max(0, x) + \gamma \min(0, x)$$

- $$\mathrm{ELU}(x) = \begin{cases} x & \text{if } x > 0 \\ \gamma(\exp(x) - 1) & \text{if } x \leq 0 \end{cases}$$
  $$= \max(0, x) + \min(0, \gamma(\exp(x) - 1))$$

- $$\mathrm{softplus}(x) = \log(1 + \exp(x))$$



- 计算上更加高效
- 生物学合理性
- 单侧抑制、宽兴奋边界
- 在一定程度上缓解梯度消失问题

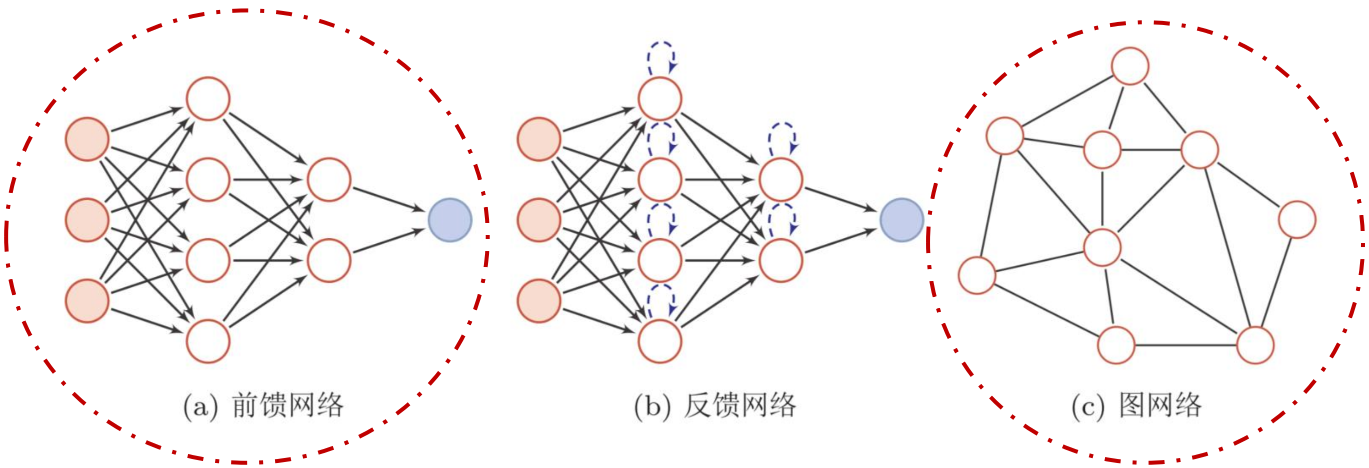
常用激活函数及导数

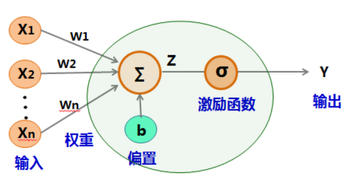
激活函数	函数	导数
Logistic 函数	$f(x)=\frac{1}{1+\exp(-x)}$	$f'(x)=f(x)(1-f(x))$
Tanh 函数	$f(x)=\frac{\exp(x)-\exp(-x)}{\exp(x)+\exp(-x)}$	$f'(x)=1-f(x)^2$
ReLU 函数	$f(x)=\max(0,x)$	$f'(x)=I(x>0)$
ELU 函数	$f(x)=\max(0,x)+\min\big(0,\gamma(\exp(x)-1)\big)$	$f'(x)=I(x>0)+I(x\leq 0)\cdot\gamma\exp(x)$
SoftPlus 函数	$f(x)=\log\big(1+\exp(x)\big)$	$f'(x)=\frac{1}{1+\exp(-x)}$

1. 人工神经元模型

■ 人工神经网络

由多个神经元组成的具有并行分布结构的神经网络模型

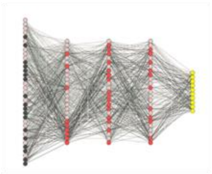




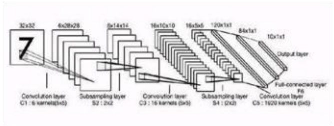
3.2 全连接前馈神经网络DNN

3.2 节内容：

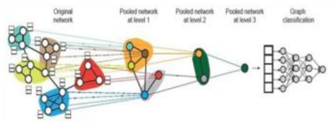
◆ 全连接前馈神经网络DNN



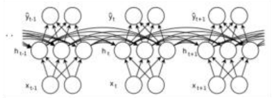
◆ 卷积神经网络CNN



◆ 图卷积神经网络GNN



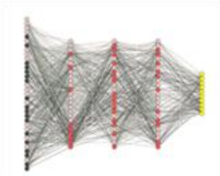
◆ 循环神经网络RNN



1. 人工神经元模型
2. 前馈神经网络DNN
3. 梯度下降法
4. 反向传播算法BP
5. 示例

神经网络基础知识	模型结构	模型训练/学习
	人工神经元模型	梯度下降法

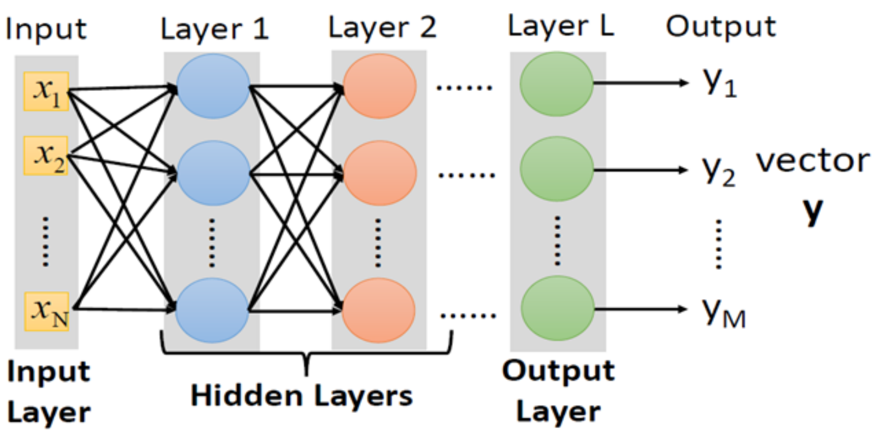
◆ 全连接前馈神经网络DNN



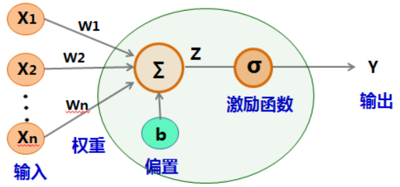
2. 前馈神经网络DNN

■ 前馈神经网络DNN

前馈神经网络中，各神经元分别属于不同的层。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 。

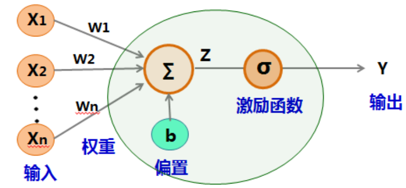


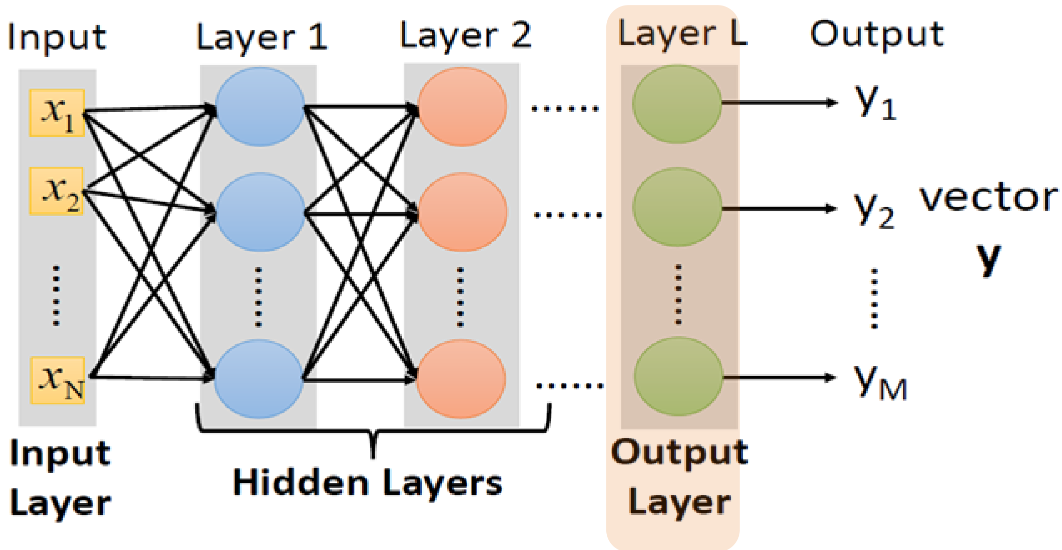
$$f: R^N \to R^M$$



2. 前馈神经网络DNN

■ DNN模型结构（输入/输出）





输出层：

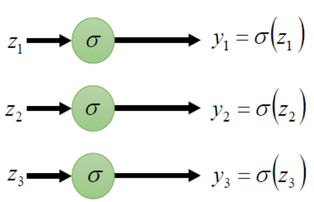
用Softmax 做输出层：

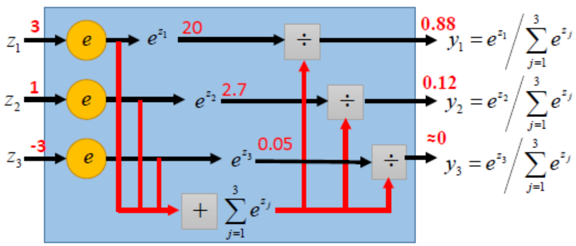
模型输入： X

模型输出： Y

模型参数：

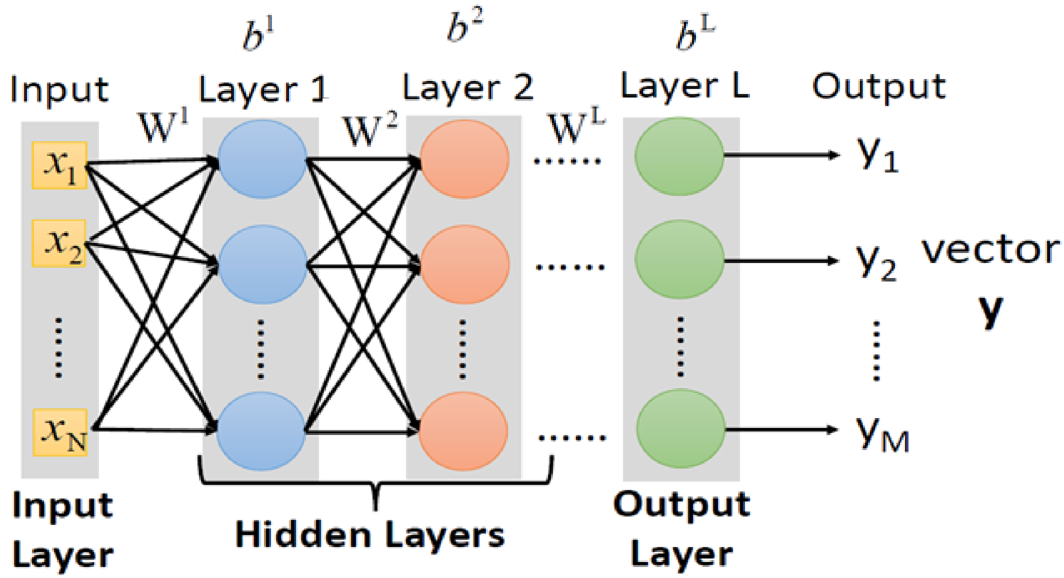
一般情况：

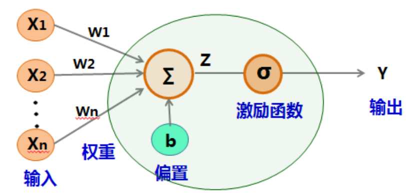




2. 前馈神经网络DNN

■ DNN模型结构 (参数)





模型输入： X

模型输出： Y

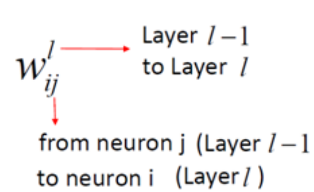
模型参数： 层间连线权重 $W^1, W^2, \cdots W^L$

各层偏置 $b^1，b^2 \cdots b^L$

参数表示说明

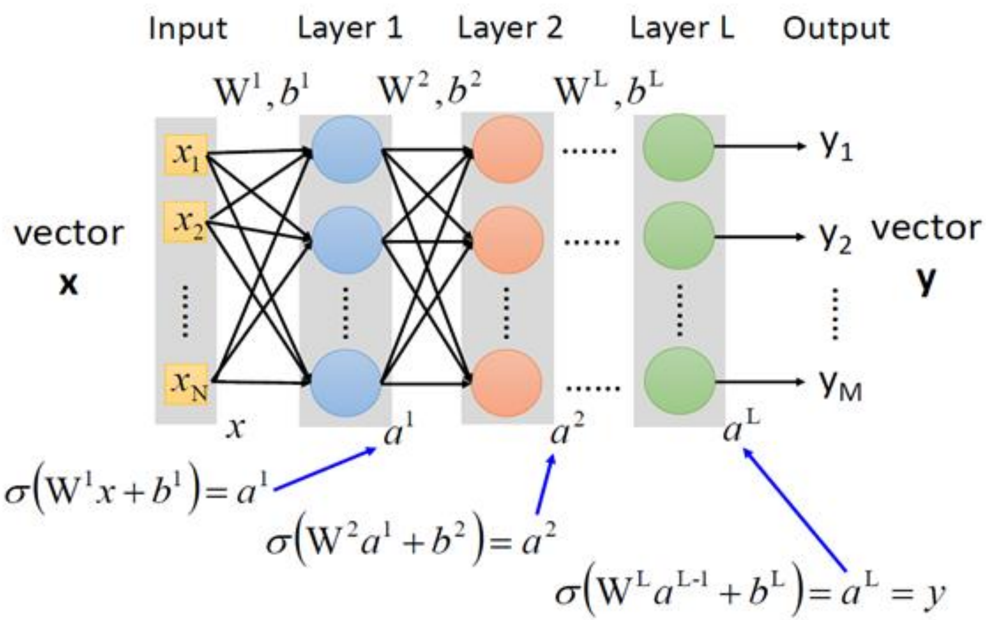
W^l : a weight matrix L-1层 到L层 权重

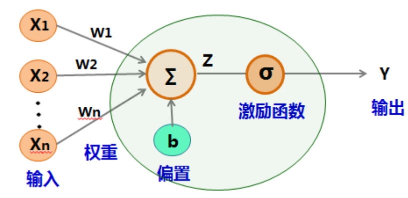
w_{ij}^l : a weight



2. 前馈神经网络DNN

■ DNN模型结构（函数关系）





输入、输出参数之间函数关系（信息传播方式）

$Y = f(x, \theta)$　　$\theta = \{W^1, b^1, W^2, b^2 \ldots W^L, b^L\}$

$$y = f(x) = \sigma\left(W^L \ldots \sigma\left(W^2 \sigma\left(W^1 x + b^1\right) + b^2\right) \ldots + b^L\right)$$

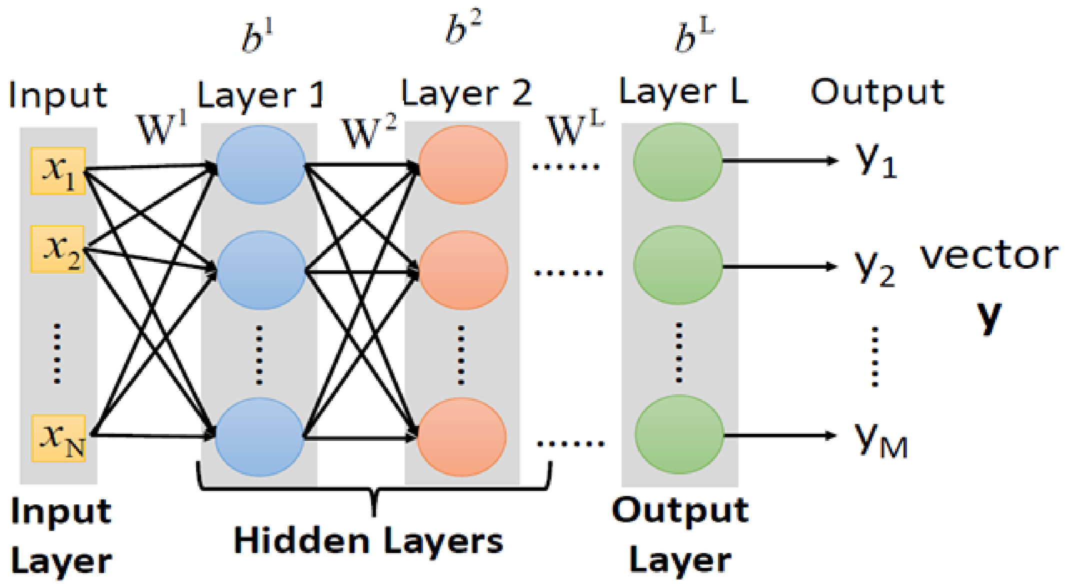
$$Z^{(L)} = W^{(L)} a^{(L-1)} + b^{(L)}$$

$$a^{(L)} = \sigma(Z^{(L)})$$

$$X = a^{(0)} \rightarrow Z^{(1)} \rightarrow a^{(1)} \rightarrow Z^{(2)} \rightarrow \ldots\ldots \rightarrow a^{(L-1)} \rightarrow Z^{(L)} \rightarrow a^{(L)} = Y$$

2. 前馈神经网络DNN

■ DNN模型结构



模型输入： X

模型输出： Y

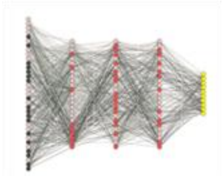
模型参数： θ= {W¹,b¹, W²,b² .... Wᴸ,bᴸ}

函数关系： $y = f(x) = \sigma\left(W^L \ldots \sigma\left(W^2 \sigma\left(W^1 x + b^1\right) + b^2\right) \ldots + b^L\right)$

3.2 全连接前馈神经网络DNN

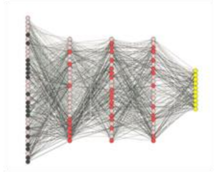
3.2 节内容：

◆ 全连接前馈神经网络DNN

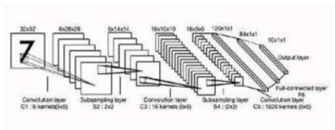


1. 人工神经元模型
2. 前馈神经网络DNN
3. 梯度下降法
4. 反向传播算法BP
5. 示例

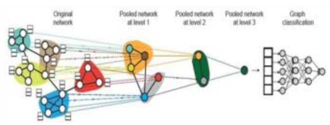
◆ 全连接前馈神经网络DNN



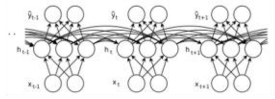
◆ 卷积神经网络CNN



◆ 图卷积神经网络GNN



◆ 循环神经网络RNN



神经网络基础知识

模型结构	模型训练/学习
人工神经元模型	梯度下降法

3. 梯度下降法

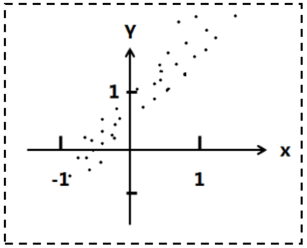
问题： 如何学习模型参数？

有监督训练：通过训练集的实例数据 （x^i; $\hat{y}^i$） 学习参数

例： y=ax+b 如何确定 a , b ?

设给定实例数据(x^i; $\hat{y}^i$)

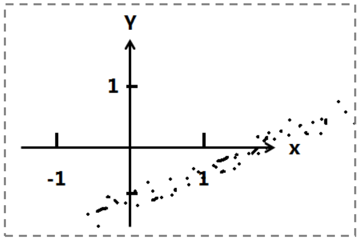
① (x^i; $\hat{y}^i$) : (1,3) , (2,5),(3,7) ….



有： a =2 ; b=1

模型 : y=2x+1

② (x^i; $\hat{y}^i$) : (2,0) , (4,1),(6,2) ….



有： a =1/2 ; b=-1

模型： y=(1/2)x-1

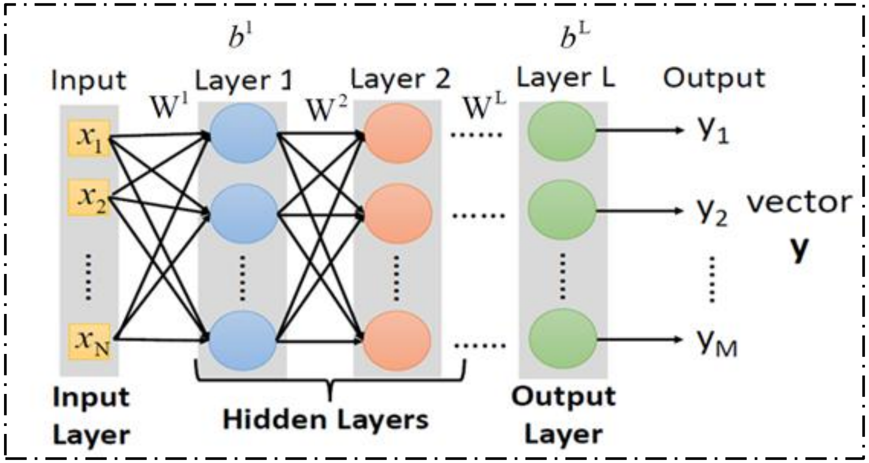
方法1： 通过列方程解决

3. 梯度下降法

神经网络参数学习问题：

有监督训练： 训练集数据（x^i; $\hat{y}^i$）学习 $\theta=\{W^1, b^1, W^2, b^2 \ldots W^L, b^L\}$

特点： 参数量巨大（达到数百万） **用方法1 解方程方法不可行**



神经网络一般用**迭代调参方式**进行参数学习

3. 梯度下降法

■ 迭代调参方法

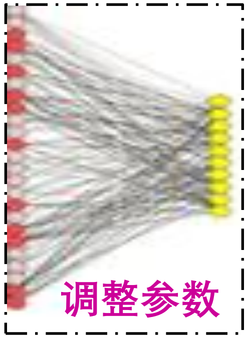
迭代调参思想：通过调整参数，让模型输出递归性地逼近标准输出。

例：设模型函数关系为 $y = f(x, \theta)$ 　　θ 为参数

训练集数据 $(x^i; \hat{y}^i)$

$y = f(x, \theta)$

输入： x^i



标准输出 $\hat{y}^i$

逼近

模型输出： $y^i = f(x^i, \theta)$

问题转化为：

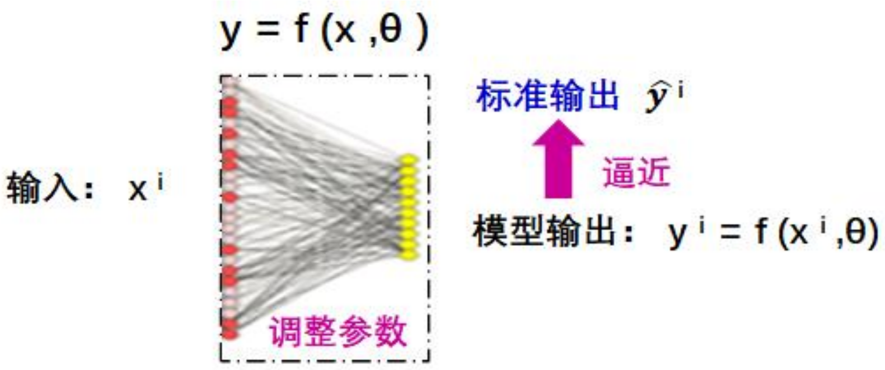
如何调节参数θ，使模型输出与标准输出差距最小?

既：用 y^i 与 $\hat{y}^i$ 的误差定义损失函数L(θ) 或 C(θ) 并求 minC(θ)

3. 梯度下降法

■ 迭代调参方法

迭代调参方法/步骤：



① 用 yi 与 $\hat{y}$ i 的误差定义 损失函数L(θ) 或 C(θ) ～ 定义目标函数

② 将问题转化为求极值问题求 minC(θ) ~ 优化目标函数

通过求损失函数的极值 来确定 模型参数

3. 梯度下降法

常用的损失函数有

- 0-1损失
- 平方损失函数
- 绝对值损失函数
- 对数损失函数
- 交叉熵（负对数似然函数）
- Hinge损失
- 指数损失

……

3. 梯度下降法

- **绝对值损失函数：**

$$L(Y, f(X, \theta)) = |Y - f(X, \theta)|$$

- **平方损失函数：**

$$L(Y, f(X, \theta)) = (Y - f(X, \theta))^2$$

- **交叉熵损失函数：**

$$L(Y, f(X, \theta)) = -\sum_{i=1}^{C} y_i \log f_i(X, \theta)$$

如对于三类分类问题，一个样本的标签向量为$\mathbf{y} = [0, 0, 1]^{\mathrm{T}}$，模型预测的标签分布为$f(\mathbf{x}; \theta) = [0.3, 0.3, 0.4]^{\mathrm{T}}$，则它们的交叉熵为

$$\mathcal{L}(\theta) = -(0 \times \log(0.3) + 0 \times \log(0.3) + 1 \times \log(0.4)) = -\log(0.4).$$

用one-hot向量y来表示目标类别c其中只有$y_c = 1$，其余的向量元素都为 0

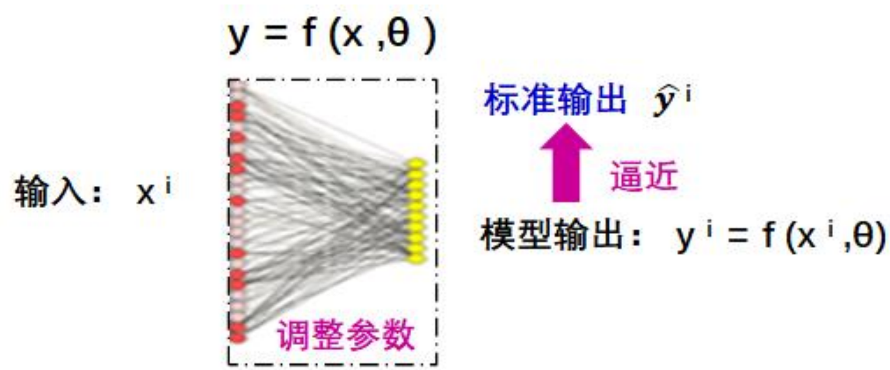
$$L(Y, f(X, \theta)) = -\log f_y(X, \theta)$$

交叉熵损失函数也是负对数似然损失函数

其中:$f_y(x,\theta)$ 为真实类别y 的似然函数。

3. 梯度下降法

① 定义目标函数（损失函数）：



① 用 y^i 与 $\hat{y}^i$ 的误差定义损失函数L(θ) 或 C(θ)

② 求 minC(θ)

如：绝对值损失函数：

$C(\theta) = L(\hat{y}, f(X, \theta)) = |\hat{y} - Y| = |\hat{y} - f(X, \theta)|$

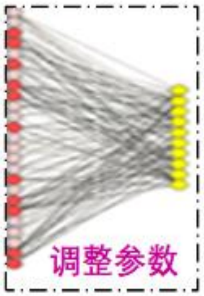
$C(y) = |\hat{y} - Y|$　　　$C(\theta) = |\hat{y} - (Y = f(X, \theta))|$　　　C(θ) 为 θ 的复合函数

3. 梯度下降法

② 求损失函数极值 minC(θ) ~ 优化目标函数

$y = f(x, \theta)$

输入： x^i

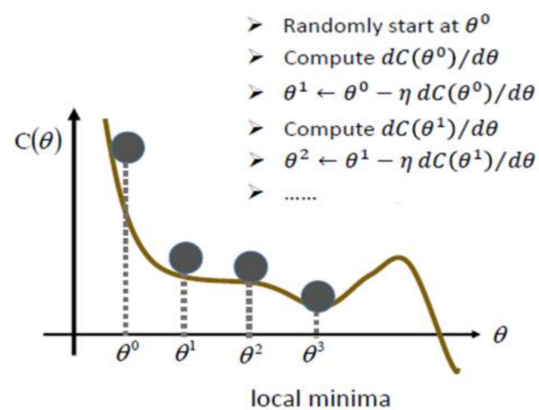


标准输出 $\hat{y}^i$

逼近

模型输出： $y^i = f(x^i, \theta)$

调参数方法- 梯度下降方法



损失函数：

$C(\theta) = L(Y, f(X, \theta)) = | Y - f(X, \theta) |$

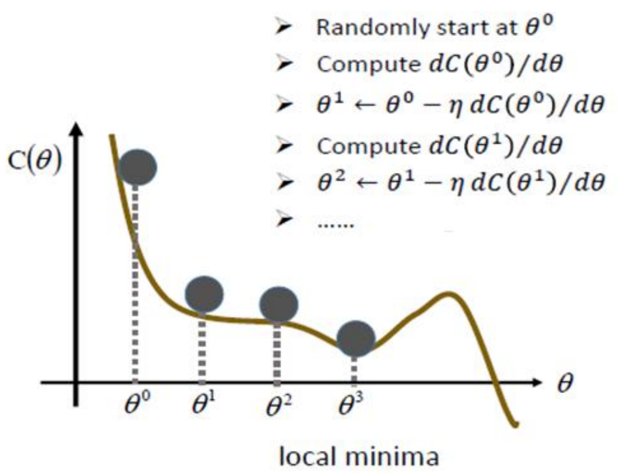
$$\boxed{\theta_{i+1} \leftarrow \theta_i - \eta\, C'(\theta_i)}$$

学习率　　损失函数梯度

$$\boxed{\text{直到 } C'(\theta_i) = 0}$$

3. 梯度下降法

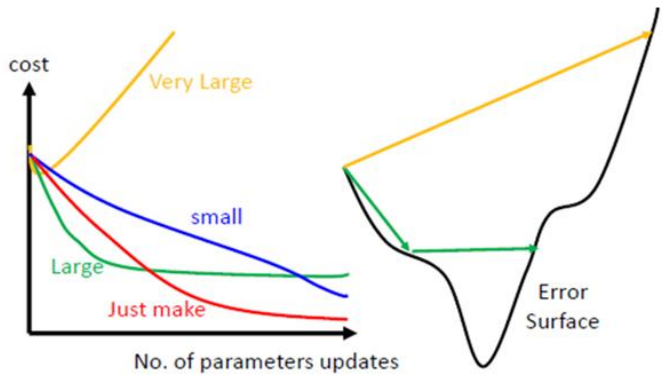
梯度下降中问题：



（1）参数初值

参数初值设置将影响参数学习效果

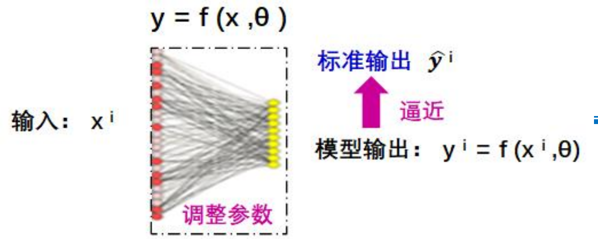
避免各参数初值设为相同值，参数初值设置尽量随机。



（2）学习率 η

学习率 η 设置时要注意不能过大或过小

3. 梯度下降法



■ 梯度下降法

给定训练集数据集 {(X^1 , $\hat{y}^1$)⋯ {(X^r, $\hat{y}^r$)⋯ {(X^R , $\hat{y}^R$)}

调参方法 $\theta^i = \theta^{i-1} - \eta \nabla C\left(\theta^{i-1}\right)$

◆ 梯度下降法（Gradient Descent）

$$C(\theta) = \frac{1}{R}\sum_r \left\| f\left(x^r;\theta\right) - \hat{y}^r \right\| \qquad \theta^i = \theta^{i-1} - \eta \nabla C\left(\theta^{i-1}\right) \qquad \nabla C\left(\theta^{i-1}\right) = \frac{1}{R}\sum_r \nabla C^r\left(\theta^{i-1}\right)$$

◆ 随机梯度下降法（Stochastic Gradient Descent）

$$C(\theta) = \left\| f\left(x^r;\theta\right) - \hat{y}^r \right\| \qquad \theta^i = \theta^{i-1} - \eta \nabla C^r\left(\theta^{i-1}\right) \qquad \nabla C\left(\theta^{i-1}\right) = \nabla C\ \left(\theta^{i-1}\right)$$

◆ mini-batch 梯度下降法（mini batch Stochastic Gradient Descent）

$$C(\theta) = \frac{1}{B}\sum_{x_r \in b} \left\| f\left(x^r;\theta\right) - \hat{y}^r \right\| \qquad \theta^i = \theta^{i-1} - \eta \nabla C^r\left(\theta^{i-1}\right) \qquad \nabla C\left(\theta^{i-1}\right) = \frac{1}{B}\sum_{x_r \in b} \nabla C^r\left(\theta^{i-1}\right)$$

3. 梯度下降法

随机梯度下降法

输入: 训练集 $\mathcal{D} = \{(\mathbf{x}^{(n)}, y^{(n)})\}_{n=1}^{N}$, 验证集 $\mathcal{V}$, 学习率 α

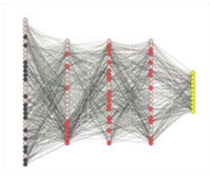
随机初始化 θ;
repeat
  对训练集 $\mathcal{D}$ 中的样本随机重排序;
  for $n = 1 \cdots N$ **do**
    从训练集 $\mathcal{D}$ 中选取样本 $(\mathbf{x}^{(n)}, y^{(n)})$;
    // 更新参数
    $\theta \leftarrow \theta - \alpha \frac{\partial \mathcal{L}\left(\theta; x^{(n)}, y^{(n)}\right)}{\partial \theta}$;
  end
until 模型 $f(\mathbf{x}; \theta)$ 在验证集 $\mathcal{V}$ 上的错误率不再下降;

输出: θ

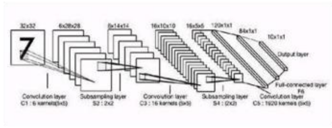
5.2 全连接前馈神经网络DNN

3.2 节内容:

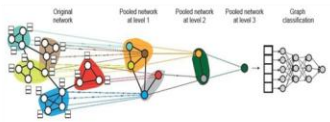
◆ 全连接前馈神经网络DNN



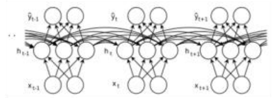
◆ 卷积神经网络CNN



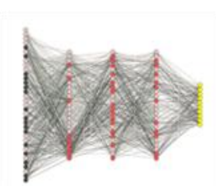
◆ 图卷积神经网络GNN



◆ 循环神经网络RNN



◆ 全连接前馈神经网络DNN



1. 人工神经元模型
2. 前馈神经网络DNN
3. 梯度下降法
4. 反向传播算法BP
5. 示例

神经网络基础知识	模型结构	模型训练/学习
	人工神经元模型	梯度下降法

4. 反向传播算法

■ 反向传播算法 （Back Propagation)

1974年Webos在博士论文中首次提出BP算法，但未引发关注 .目前广泛使用的BP算法诞生于1986年 以全连接层为例：链式求 导，梯度反向传导 .

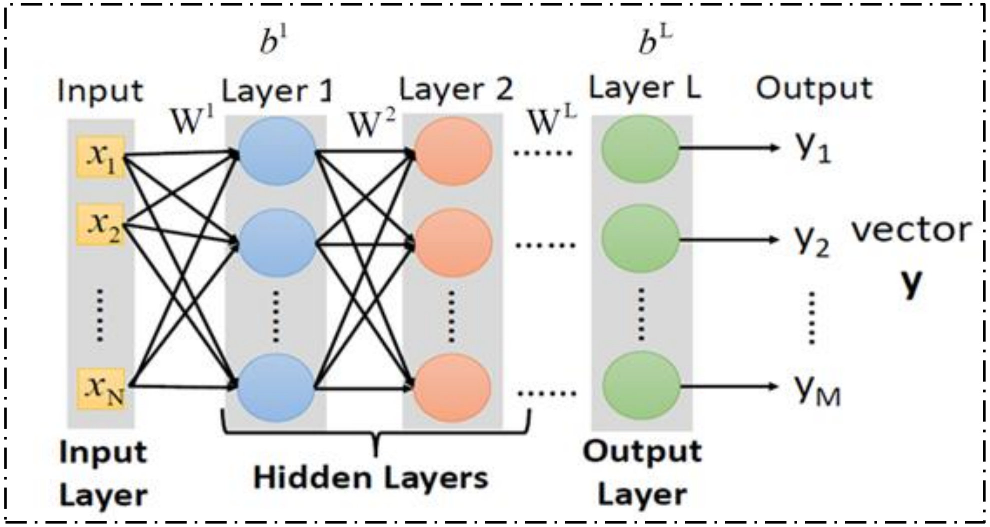
核心思想：

将输出误差以某种形式反传给各层所有的单元，各层按本层误差修正各单元连接权值。

有监督学习，采用梯度下降法调参

4. 反向传播算法

■ 反向传播算法 （Back Propagation ）



全连接前馈神经网

任务：给定训练集数据集 $\{(x^1, \hat{y}^1) \cdots \{(x^r, \hat{y}^r) \cdots \{(x^R, \hat{y}^R)\}$

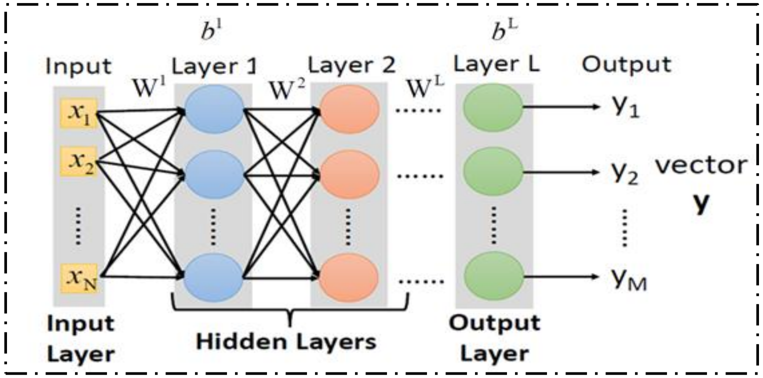
学习 网络参数 $\theta = \{W^1, b^1, W^2, b^2 \cdots W^L, b^L\}$

4. 反向传播算法

① 定义损失函数

训练集数据 $\{(x^1, \hat{y}^1) \cdots (x^r, \hat{y}^r) \cdots (x^R, \hat{y}^R)\}$

输入 x^i



标准输出 $\hat{y}^i$

模型输出 $y^i = f(x^i, \theta)$

函数： $y = f(x) = \sigma\left(W^L \ldots \sigma\left(W^2 \sigma\left(W^1 x + b^1\right) + b^2\right) \ldots + b^L\right)$

参数： $\theta = \{W^1, b^1, W^2, b^2 \cdots W^L, b^L\}$

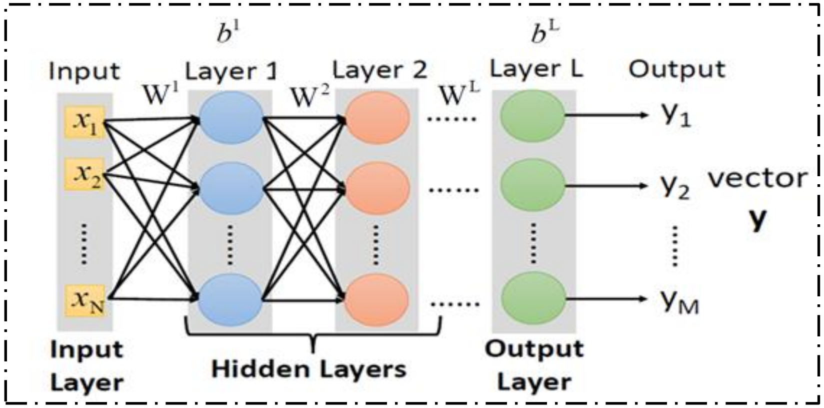
损失函数 $C(\theta) = \frac{1}{R}\sum_r \left\| f(x^r; \theta) - \hat{y}^r \right\| = \frac{1}{R}\sum_r \left\| \sigma\left(W^L \ldots \sigma\left(W^2 \sigma\left(W^1 x + b^1\right) + b^2\right) \ldots + b^L\right) - \hat{y}^r \right\|$

$C(y) = |\hat{y} - Y|$ $C(\theta) = |\hat{y} - (Y = f(X, \theta))|$ $C(\theta)$ 为 θ 的复合函数

② 优化目标函数（调参）

训练集数据 $\{(x^1, \hat{y}^1)\cdots(x^r, \hat{y}^r)\cdots(x^R, \hat{y}^R)\}$

输入 x^i



标准输出 $\hat{y}^i$

模型输出 $y^i = f(x^i, \theta)$

损失函数 $$C(\theta)=\frac{1}{R}\sum_r\left\|f(x^r;\theta)-\hat{y}^r\right\| \quad =\frac{1}{R}\sum_r\left\|\sigma\left(W^L\ldots\sigma\left(W^2\sigma\left(W^1x+b^1\right)+b^2\right)\ldots+b^L\right)-\hat{y}^r\right\|$$

参数： $\theta=\{W^1, b^1, W^2, b^2\cdots W^L, b^L\}$

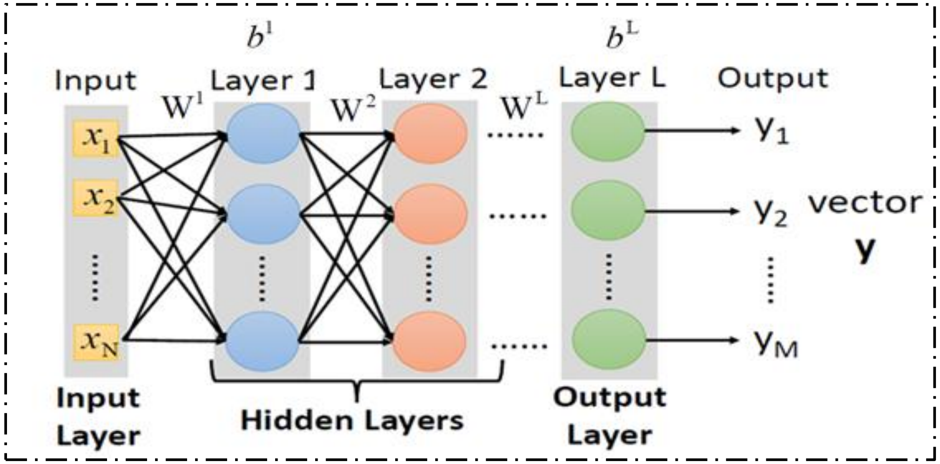
优化目标： $\theta^* = arg\min_\theta C(\theta)$

4. 反向传播算法

② 优化目标函数（调参）

训练集数据 $\{(x^1, \hat{y}^1)\cdots(x^r, \hat{y}^r)\cdots(x^R, \hat{y}^R)\}$

输入 x^i



标准输出 $\hat{y}^i$

模型输出 $y^i = f(x^i, \theta)$

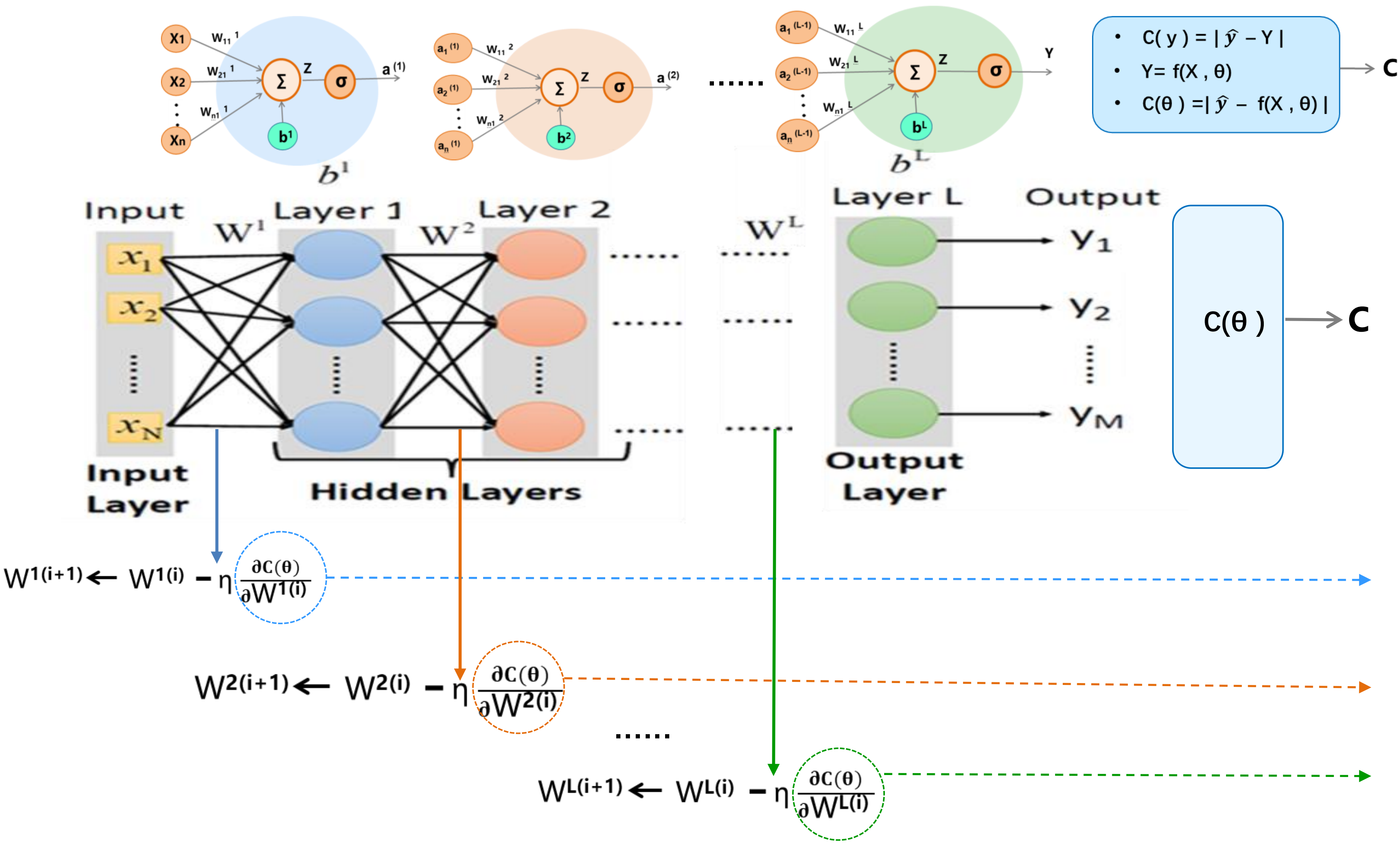
调参： 各层均采用梯度下降法调整参数　　参数： $\theta=\{W^1, b^1, W^2, b^2\cdots W^L, b^L\}$

$$W^{1l} \leftarrow W^{l0} - \eta \frac{\partial C(\theta)}{\partial W^{l0}} \qquad b^{l1} \leftarrow b^{l0} - \eta \frac{\partial C(\theta)}{\partial b^{l0}}$$

问题：各层参数是损失函数的多层复合函数，如何求各参数对损失函数的导数？

4. 反向传播算法

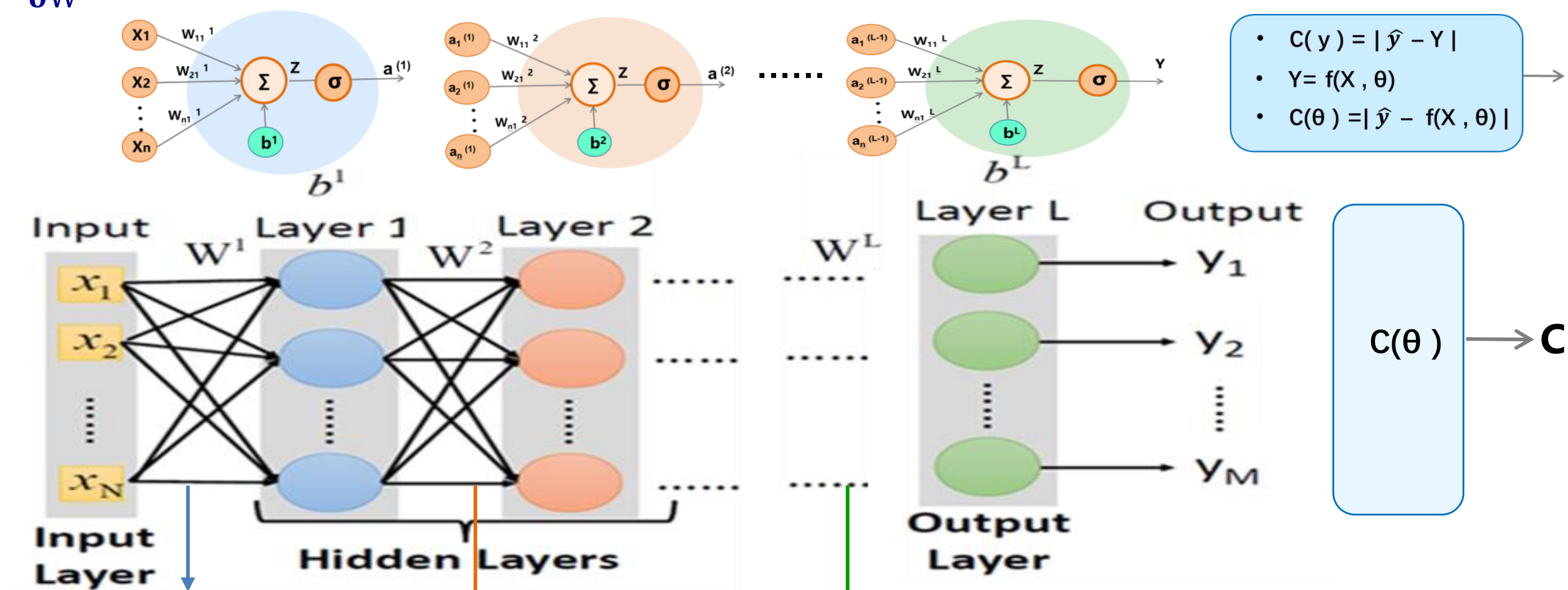
各层参数与损失函数的关系：



4. 反向传播算法

求：$\dfrac{\partial C(\theta)}{\partial W^L}$

$$Z^{(L)} = W^{(L)} a^{(L-1)} + b^{(L)} \qquad a^{(L)} = \sigma(Z^{(L)})$$



$$\frac{\partial C(\theta)}{\partial W^1} = \frac{\partial z^1}{\partial W^1}\,\frac{\partial C(\theta)}{\partial z^1}$$

$$\frac{\partial C(\theta)}{\partial W^2} = \frac{\partial z^2}{\partial W^2}\,\frac{\partial C(\theta)}{\partial z^2}$$

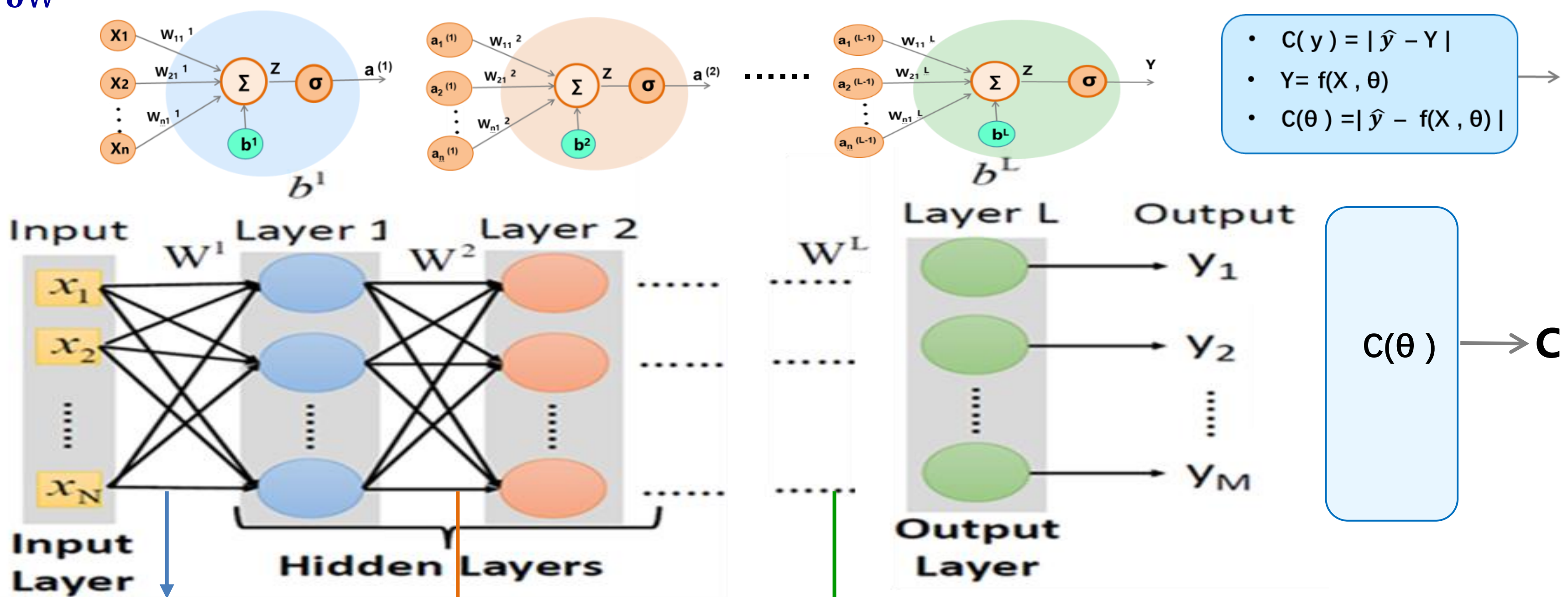
……

$$\frac{\partial C(\theta)}{\partial W^L} = \frac{\partial z^L}{\partial W^L}\,\frac{\partial C(\theta)}{\partial z^L}$$

4. 反向传播算法

求：$\dfrac{\partial C(\theta)}{\partial W^{L}}$

$$Z^{(L)} = W^{(L)} a^{(L-1)} + b^{(L)} \qquad a^{(L)} = \sigma(Z^{(L)})$$



$$\frac{\partial C(\theta)}{\partial W^{1(i)}} = \boxed{\frac{\partial z^{1}}{\partial W^{1}}} \; \frac{\partial C(\theta)}{\partial z^{1}}$$

a^{0}

输入 X

$$\frac{\partial C(\theta)}{\partial W^{2}} = \boxed{\frac{\partial z^{2}}{\partial W^{2}}} \; \frac{\partial C(\theta)}{\partial z^{2}}$$

a^{1}

......

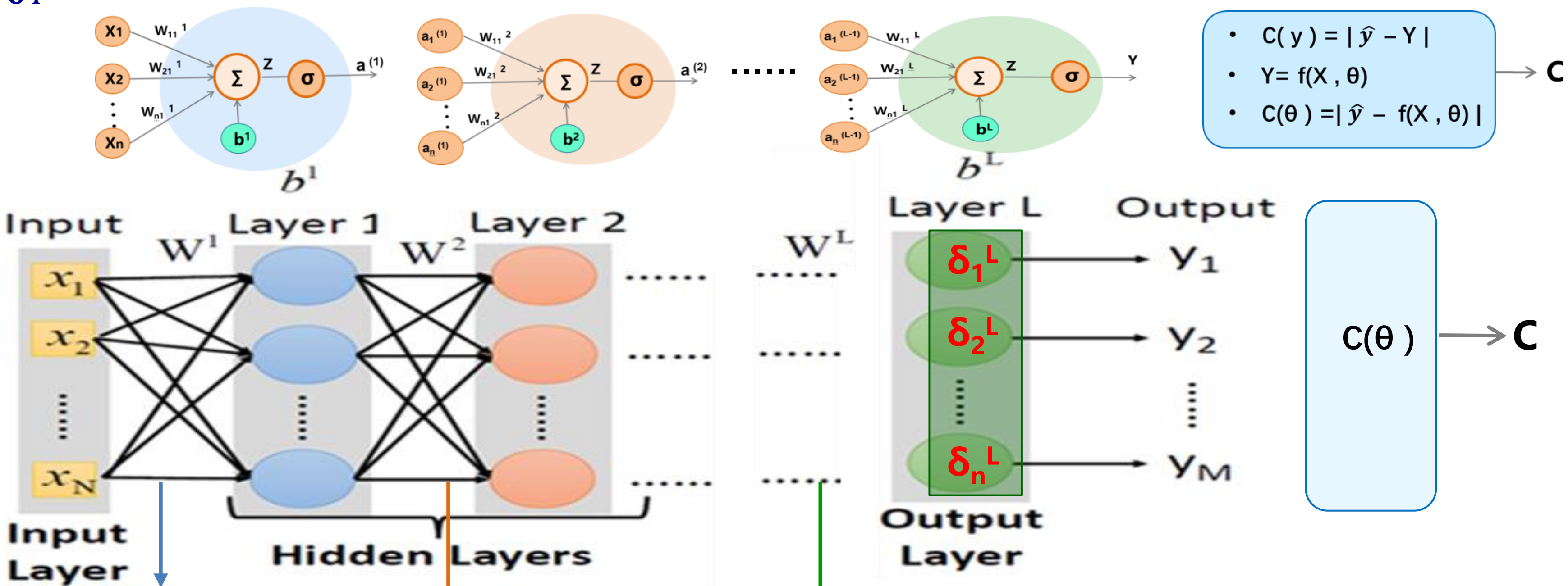
$$\frac{\partial C(\theta)}{\partial W^{L}} = \boxed{\frac{\partial z^{L}}{\partial W^{L}}} \; \frac{\partial C(\theta)}{\partial z^{L}}$$

a^{L-1}

4. 反向传播算法

求：$\frac{\partial C(\theta)}{\partial Y^L}$

$$Z^{(L)} = W^{(L)} a^{(L-1)} + b^{(L)} \qquad a^{(L)} = \sigma(Z^{(L)})$$



$$\frac{\partial C(\theta)}{\partial W^1} = \frac{\partial z^1}{\partial W^1} \frac{\partial C(\theta)}{\partial z^1}$$

a ^{0}

$$\frac{\partial C(\theta)}{\partial W^2} = \frac{\partial z^2}{\partial W^2} \frac{\partial C(\theta)}{\partial z^2}$$

a $^{1)}$

......

$$\frac{\partial C(\theta)}{\partial W^L} = \frac{\partial z^L}{\partial W^L} \frac{\partial C(\theta)}{\partial z^L}$$

a $^{L-1}$

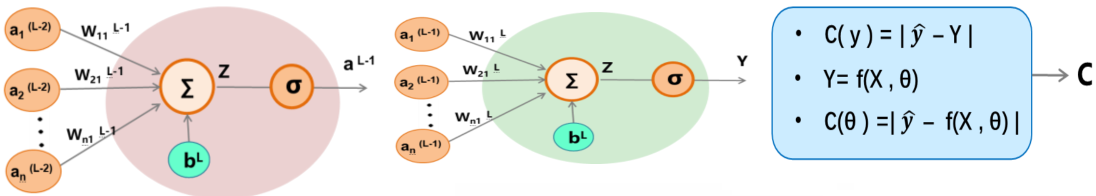
$$\frac{\partial C(\theta)}{\partial z^L} = \frac{\partial Y^L}{\partial z^L} \frac{\partial C(\theta)}{\partial Y^L}$$

$\sigma'(Z^L)$ C' (Y) = | $\hat{y}$ – Y |

定义 $\delta^l = \frac{\partial C(\theta)}{\partial z^{L(i)}}$ $\delta^L = \sigma'(Z^L) \bullet \nabla C'(Y^r)$

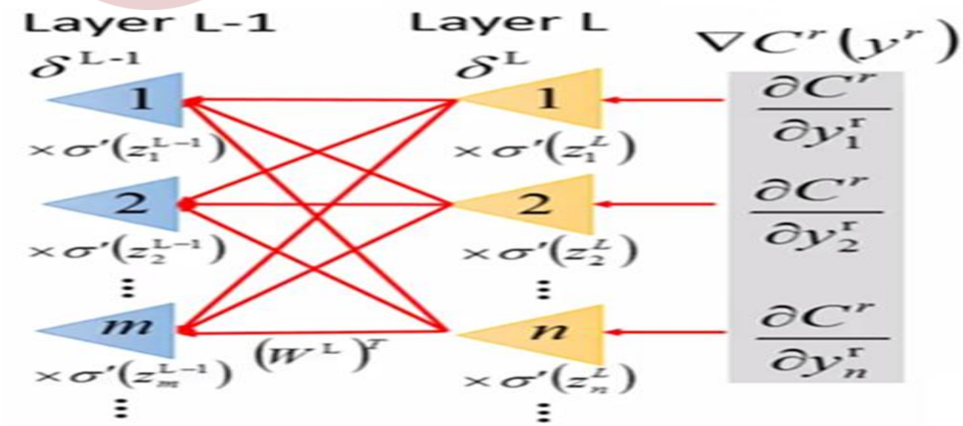
4. 反向传播算法

求 L 层 δ^L 与 L-1 层 δ^{L-1} 的关系 (关键步骤)



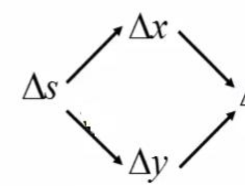
$$Z^{(L)} = W^{(L)} a^{(L-1)} + b^{(L)}$$

$$a^{(L)} = \sigma(Z^{(L)})$$



链式法则：

$x = g(s) \qquad y = h(s) \qquad z = k(x, y)$

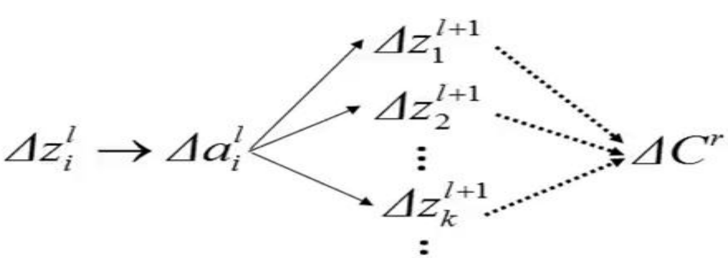


$$\frac{\partial z}{\partial s} = \frac{\partial z}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial s} + \frac{\partial z}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial s}$$

δ^{L-1} δ^L

$$\frac{\partial C(\theta)}{\partial z^{L-1}} \qquad \frac{\partial C(\theta)}{\partial z^{L}} = \sigma'(Z^L)\bullet \nabla C'(Y^r)$$

$$\delta_i^{L-1} = \sigma'(Z_i^{L-1}) \sum_k W_{ki}^L \delta_K^L$$



误差反传公式

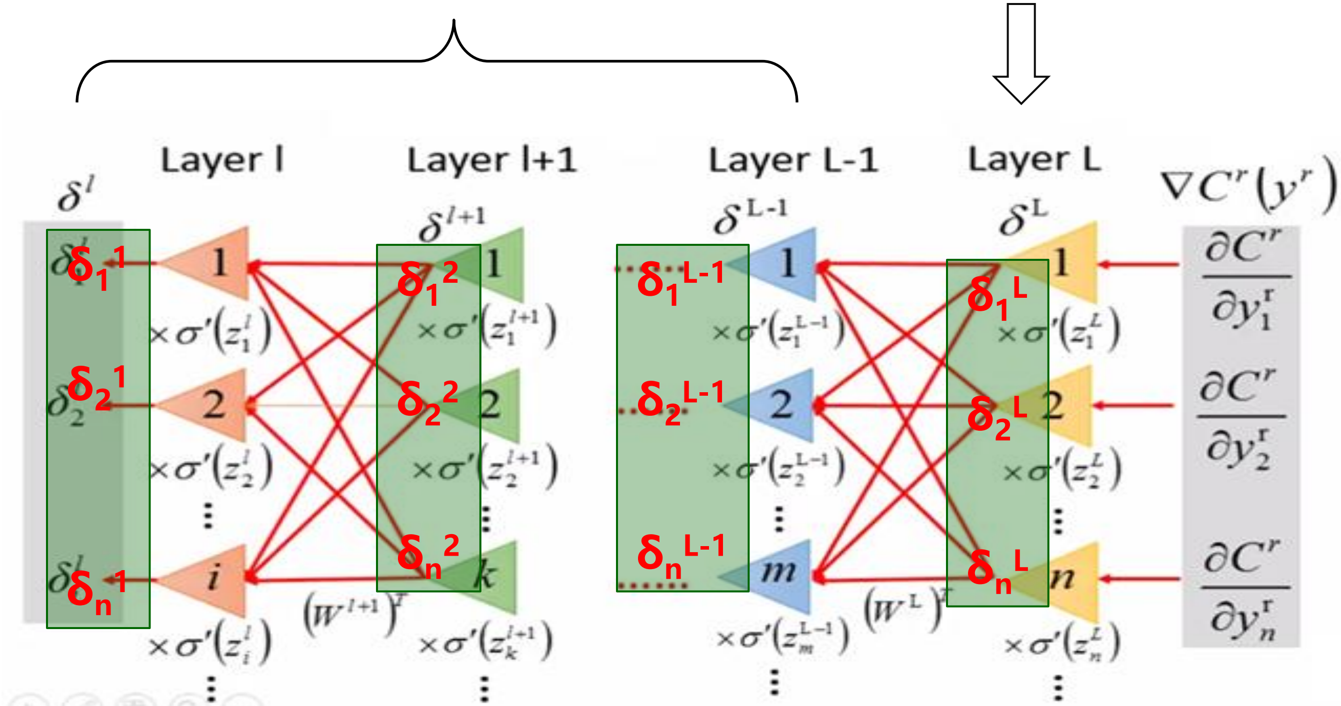
$$\boxed{\delta^{L-1} = \sigma'(Z^{L-1}) \bullet (W^L)^T \delta^L}$$

4. 反向传播算法

误差反传过程：

首先计算最后层误差δ^L，然后根据误差反传公式求得 倒数第二层误差δ^{L-1}直至第一层。

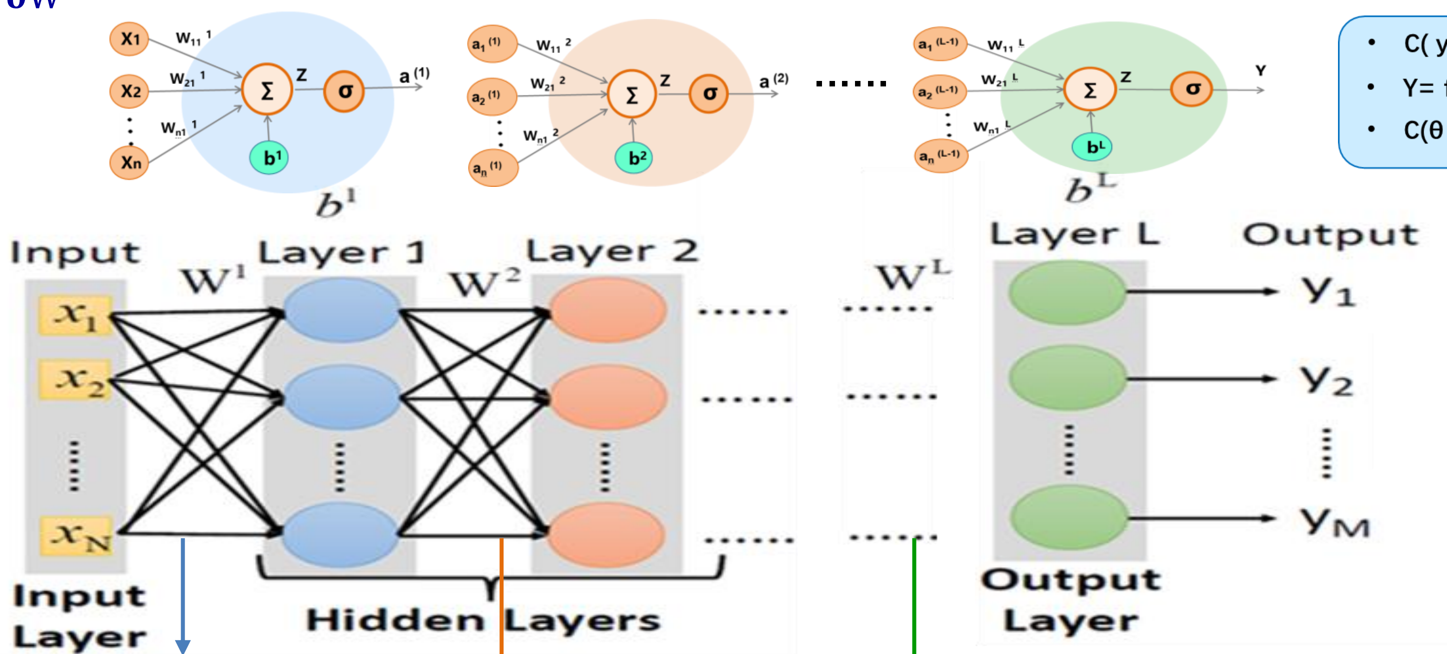
$\delta^{L-1} = \sigma'(Z^{L-1}) \bullet (W^L)^T \delta^L$　　　$\delta^L = \sigma'(Z^L) \bullet \nabla C'(Y^r)$



4. 反向传播算法

求：$\dfrac{\partial C(\theta)}{\partial W^L}$

$$Z^{(L)} = W^{(L)} a^{(L-1)} + b^{(L)} \qquad a^{(L)} = \sigma(Z^{(L)})$$



- $C(y) = |\hat{y} - Y|$
- $Y = f(X, \theta)$
- $C(\theta) = |\hat{y} - f(X, \theta)|$

→ C

$C(\theta)$ → C

$$\frac{\partial C(\theta)}{\partial W^1} = \boxed{\frac{\partial z^1}{\partial W^1}} \frac{\partial C(\theta)}{\partial z^1}$$

a^0 δ^1

$$\frac{\partial C(\theta)}{\partial W^2} = \boxed{\frac{\partial z^2}{\partial W^2}} \frac{\partial C(\theta)}{\partial z^2}$$

a^1 δ^2 ……

……

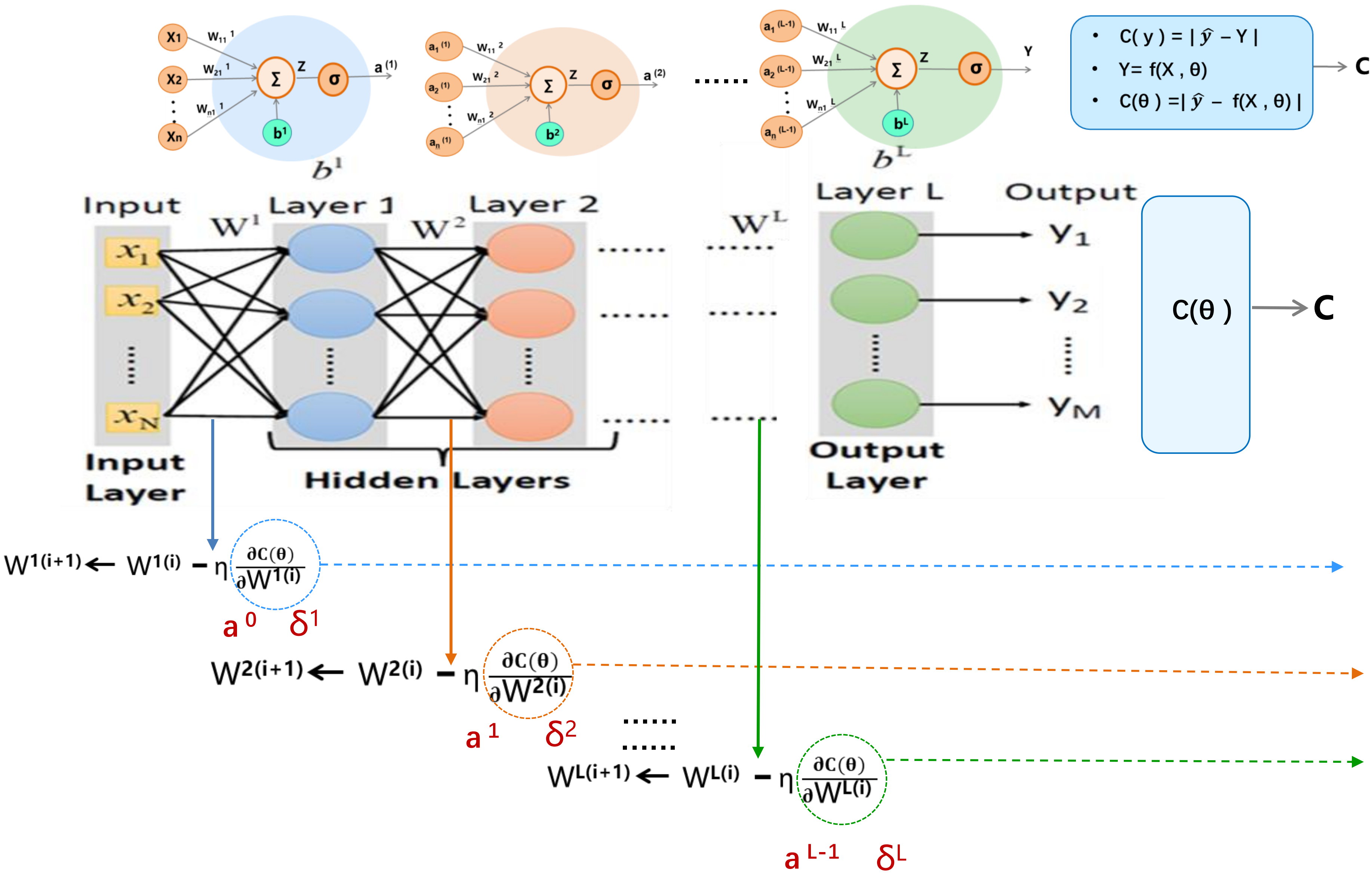
$$\frac{\partial C(\theta)}{\partial W^L} = \boxed{\frac{\partial z^L}{\partial W^L}} \frac{\partial C(\theta)}{\partial z^L}$$

a^{L-1} δ^L

4. 反向传播算法

BP 算法学习过程

$Z^{(L)} = W^{(L)} a^{(L-1)} + b^{(L)} \qquad a^{(L)} = \sigma(Z^{(L)})$



4. 反向传播算法

前馈神经网络的训练过程可以分为以下三步：

（1）先前馈计算每一层的状态和激活值，直到最后一层；

（2）反向传播计算每一层的误差；

（3）计算每一层参数的偏导数，并更新参数

4. 反向传播算法

反向传播算法

输入: 训练集: $(\mathbf{x}^{(i)}, y^{(i)}), i = 1, \cdots, N$，最大迭代次数：$T$

输出: $W, \mathbf{b}$

初始化 $W, \mathbf{b}$;

for $t = 1 \cdots T$ **do**

  for $i = 1 \cdots N$ **do**

    (1) 前馈计算每一层的状态和激活值，直到最后一层;

    (2) 用公式(3)反向传播计算每一层的误差 $\delta^{(l)}$;

    (3) 用公式(1)和(2)每一层参数的导数;

$$\frac{\partial C(W, \mathbf{b}; \mathbf{x}, y)}{\partial W^{(l)}} = \delta^{(l)} (\mathbf{a}^{(l-1)})^T$$

$$\frac{\partial C(W, \mathbf{b}; \mathbf{x}, y)}{\partial \mathbf{b}^{(l)}} = \delta^{(l)}$$

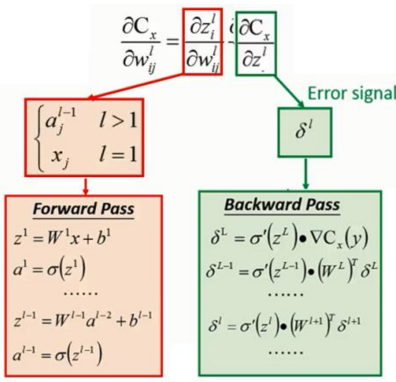
    (4) 更新参数;

$$W^{(l)} = W^{(l)} - \alpha \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{\partial C(W, \mathbf{b}; \mathbf{x}^{(i)}, y^{(i)})}{\partial W^{(l)}}\right)$$

$$\mathbf{b}^{(l)} = \mathbf{b}^{(l)} - \alpha \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{\partial C(W, \mathbf{b}; \mathbf{x}^{(i)}, y^{(i)})}{\partial \mathbf{b}^{(l)}}\right);$$

  end

end



(1)

$$\frac{\partial C(W, \mathbf{b}; \mathbf{x}, y)}{\partial W^{(l)}} = \delta^{(l)} (\mathbf{a}^{(l-1)})^T$$

(2)

$$\frac{\partial C(W, \mathbf{b}; \mathbf{x}, y)}{\partial \mathbf{b}^{(l)}} = \delta^{(l)}$$

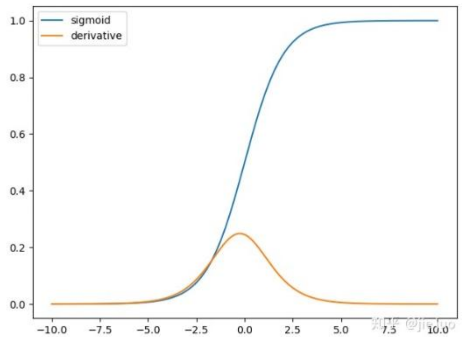
(3)

$$\delta^l = \sigma'(z^l) \bullet (W^{l+1})^T \delta^{l+1}$$

4. 反向传播算法

梯度消失问题 - 激活函数分析

◆ Sigmoid函数

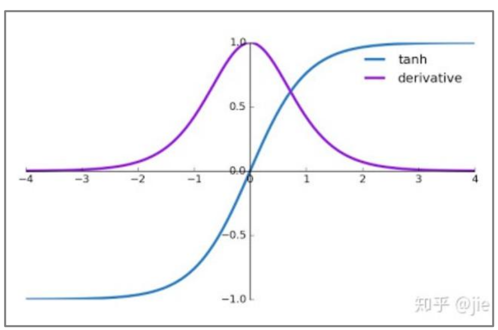


表达式：$\sigma(x) = \dfrac{1}{1+e^{-x}}$

值域：（0，1）

导数值域：（0，0.25）

◆ Tanh函数



表达式：$\sigma(x) = \dfrac{e^{x}-e^{-x}}{e^{x}+e^{-x}}$

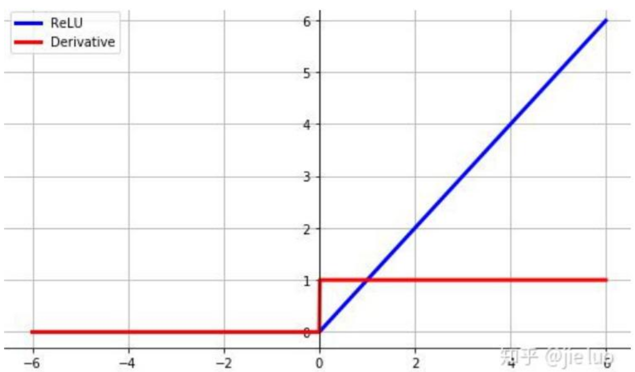
值域：(-1,1), 当|x|>3时，函数容易饱和。

导数值域：（0，1），当|x|>3时，梯度几乎为0。

4. 反向传播算法

◆ ReLU函数

表达式： $\sigma(x) = max(0, x)$



- 值域：当x<0时，函数值为0，当x>0时，函数值跟x线性增长。
- 导数值域：当x<0时，导函数值为0，当x>0时，导函数值为0。

在神经网络中误差反向传播的迭代公式为 $\delta^{l} = \sigma'(z^{l}) \bullet (W^{l+1})^{T} \delta^{l+1}$

其中需要用到激活函数σ(Z^{L})的导数误差从输出层反向传播时每层都要乘激活函数导数。这样当激活函数导数值小于 1 时 ，误差经过每一层传递都会不断衰减，当网络很深时甚至消失

4. 反向传播算法

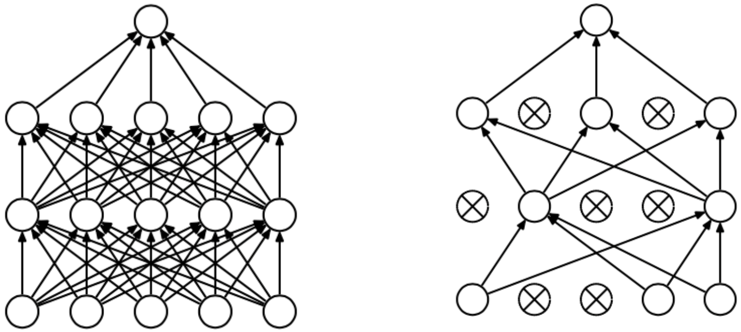
解决梯度梯度消失问题方法

- 选择合适的激活函数
- 用复杂的门结构代替激活函数
- 残差结构

解决过拟合问题方法

选择合适的正则方法

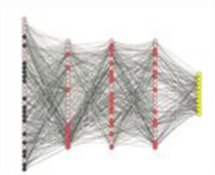
- Dropout
- 损失函数加入适当的正则项



3.2 全连接前馈神经网络DNN

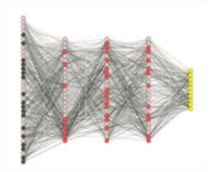
3.2 节内容：

◆ 全连接前馈神经网络DNN

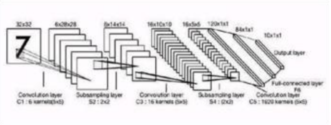


1. 人工神经元模型
2. 前馈神经网络DNN
3. 梯度下降法
4. 反向传播算法BP
5. 示例

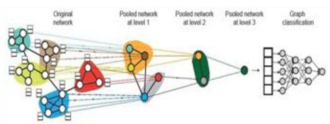
◆ 全连接前馈神经网络DNN



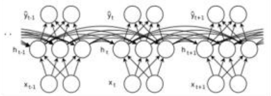
◆ 卷积神经网络CNN



◆ 图卷积神经网络GNN



◆ 循环神经网络RNN



神经网络基础知识	模型结构	模型训练/学习
	人工神经元模型	梯度下降法

5. 前馈神经网分类问题示例

任务：用前馈神经网实现花的分类

输入：花的 萼片长度、萼片宽度、花瓣长度、花瓣宽度

输出：花的种类

已知：数据集共包含150个实例，3个品种的花各有50个格式如下：

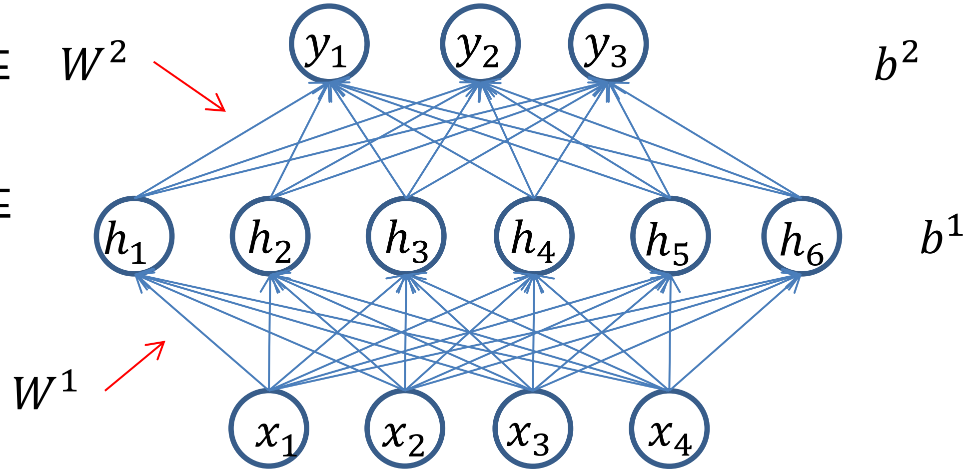
序号	萼片长度	萼片宽度	花瓣长度	花瓣宽度	类别
1	5.1	3.5	1.4	0.2	1
50	5	3.3	1.4	0.2	1
51	7	3.2	4.7	1.4	2
100	5.7	2.8	4.1	1.3	2
101	6.3	3.3	6	2.5	3
150	5.9	3	5.1	1.8	3

将每个类别的前40个，共120个实例组成训练集，其余30个实例组成测试集。

5. 前馈神经网分类问题示例

■ 模型结构

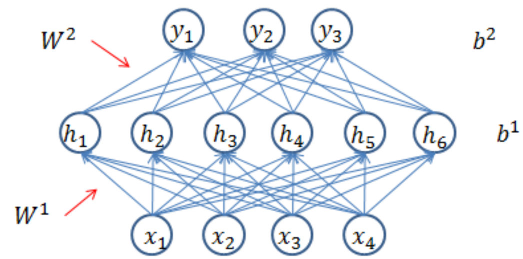
- **构建包含一个隐含层的神经网络DNN模型**
  - 输入层神经元数量：4，对应特征向量维度。
  - 隐含层神经元数量：6，根据经验公式($\sqrt{\boldsymbol{n}+\boldsymbol{m}}+\boldsymbol{a}$)取值。 $\boldsymbol{a}\epsilon[\mathbf{1},\mathbf{10}]$
  - 输出层神经元数量：3，对应目标类别的数量。
- **输入、输出、参数**
  - x表示模型输入
  - H表示隐含状态
  - y表示模型输出
  - W^1表示输入-隐含层权值矩阵
  - b^1表示隐含层偏置
  - W^2表示隐含-输出层权值矩阵
  - b^2表示输出层偏置



5. 前馈神经网络分类问题示例

- **参数包括 $\boldsymbol{W^1}$，$\boldsymbol{b^1}$，$\boldsymbol{W^2}$，$\boldsymbol{b^2}$**

$$W^1 = \begin{bmatrix} W^1_{(1,1)}, W^1_{(1,2)}, W^1_{(1,3)}, W^1_{(1,4)}, W^1_{(1,5)}, W^1_{(1,6)} \\ W^1_{(2,1)}, W^1_{(2,2)}, W^1_{(2,3)}, W^1_{(2,4)}, W^1_{(2,5)}, W^1_{(2,6)} \\ W^1_{(3,1)}, W^1_{(3,2)}, W^1_{(3,3)}, W^1_{(3,4)}, W^1_{(3,5)}, W^1_{(3,6)} \\ W^1_{(4,1)}, W^1_{(4,2)}, W^1_{(4,3)}, W^1_{(4,4)}, W^1_{(4,5)}, W^1_{(4,6)} \end{bmatrix}$$

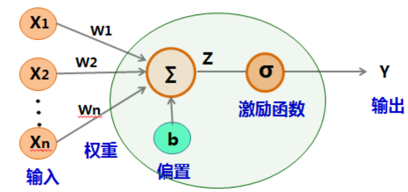


$$b^1 = [b^1_1, b^1_2, b^1_3, b^1_4, b^1_5, b^1_6]^T$$

$$W^2 = \begin{bmatrix} W^2_{(1,1)}, W^2_{(1,2)}, W^2_{(1,3)} \\ W^2_{(2,1)}, W^2_{(2,2)}, W^2_{(2,3)} \\ W^2_{(3,1)}, W^2_{(3,2)}, W^2_{(3,3)} \\ w^2_{(4,1)}, w^2_{(4,2)}, w^2_{(4,3)} \\ w^2_{(5,1)}, w^2_{(5,2)}, w^2_{(5,3)} \\ w^2_{(6,1)}, w^2_{(6,2)}, w^2_{(6,3)} \end{bmatrix} \qquad b^2 = \begin{bmatrix} b^2_1 \\ b^2_2 \\ b^2_3 \end{bmatrix}$$

5. 前馈神经网分类问题示例

运算关系：



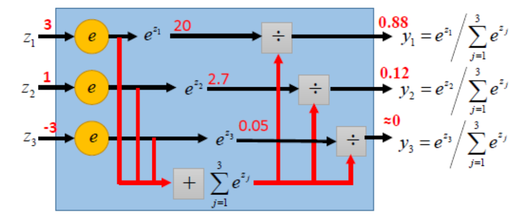
-- 隐含层

$$h_1 = sigmoid\left(\left(\sum_{i=1}^{4} x_i W^1_{(i,1)}\right) + b^1_1\right)$$

隐含层神经元向量化表示为：

$$H = sigmoid(xW^1 + b^1)$$

用Softmax 做输出层：

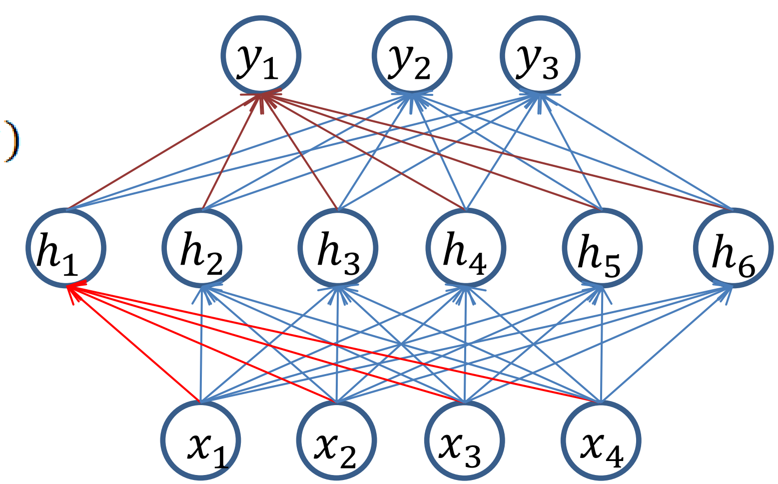


--输出层

$$(y_{pred} \sim Z)_1 = \sum_{i=1}^{6} h_i W^2_{(i,1)} + b^2_1$$

输出层神经元向量化表示为：

$$y_{pred} = softmax(HW^2 + b^2)$$



5. 前馈神经网分类问题示例

■ 模型学习

梯度下降法训练模型参数

训练集数据 (x^i, $\hat{y}^i$) 的格式

定义损失函数

交叉熵损失： $J(\theta; x, y) = -\sum_{j=1}^{3} y_j \log((y_{pred})_j)$ $\boxed{\theta = [W^1, b^1, W^2, b^2]}$

整体损失： $J(\theta) = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} J(\theta; x^{(i)}, y^{(i)})$

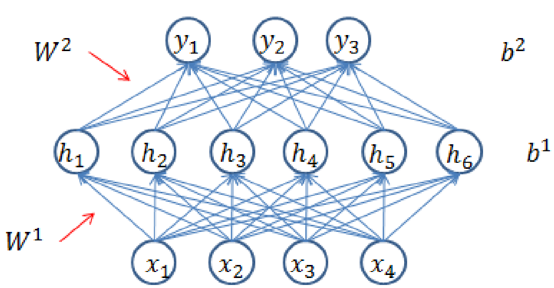
初始化参数： W^1， b^1， W^2， b^2

用BP算法训练参数 W^1， b^1， W^2， b^2。

5. 前馈神经网分类问题示例

训练结果（神经网络权值和阈值）：

```
W1:  [[-0.92051142 -0.26299602 -1.31182587 -0.01975909 -0.59453297 -1.11046791]
 [-0.28832591 -1.20107734 -0.9193843   2.20059323 -1.76573455 -0.85953856]
 [-2.33936191  2.61448216 -0.70324481 -2.55568218  2.42951894 -1.61432779]
 [-2.24077463  2.89018154  0.49342883 -2.72368193  4.8323493   1.31086338]]
b1:  [ -2.00212002  -2.24461389  -0.26081288   0.61751789 -11.42080021
  -0.88119394]
W2:  [[ -0.47563726  -0.80865479  -1.70860052]
 [ -4.02558851   4.80955172   1.79265082]
 [  0.18003793   0.4045147    0.40952846]
 [  8.4482317   -6.87298441  -4.0685277 ]
 [ -2.96541858  -5.34733152  11.1489048 ]
 [  0.08154635   0.21151544  -0.45402744]]
b2:  [ 0.90756476  2.25174689 -2.58430076]
```



序号	萼片长度	萼片宽度	花瓣长度	花瓣宽度	类别
1	5.1	3.5	1.4	0.2	1
50	5	3.3	1.4	0.2	1
51	7	3.2	4.7	1.4	2
100	5.7	2.8	4.1	1.3	2
101	6.3	3.3	6	2.5	3
150	5.9	3	5.1	1.8	3

5. 前馈神经网分类问题示例

预测

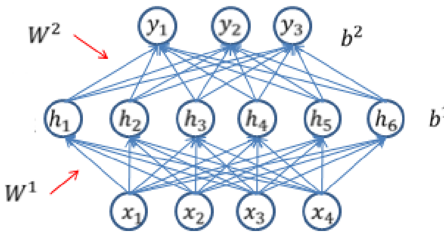
预测数据

序号	萼片长度	萼片宽度	花瓣长度	花瓣宽度	类别
1	5	3.5	1.3	0.3	1,0,0
2	4.5	2.3	1.3	0.3	1,0,0
3	5.5	2.6	4.4	1.2	0,1,0
4	6.1	3	4.6	1.4	0,1,0
5	6.7	3.1	5.6	2.4	0,0,1
6	6.9	3.1	5.1	2.3	0,0,1

x

预测结果

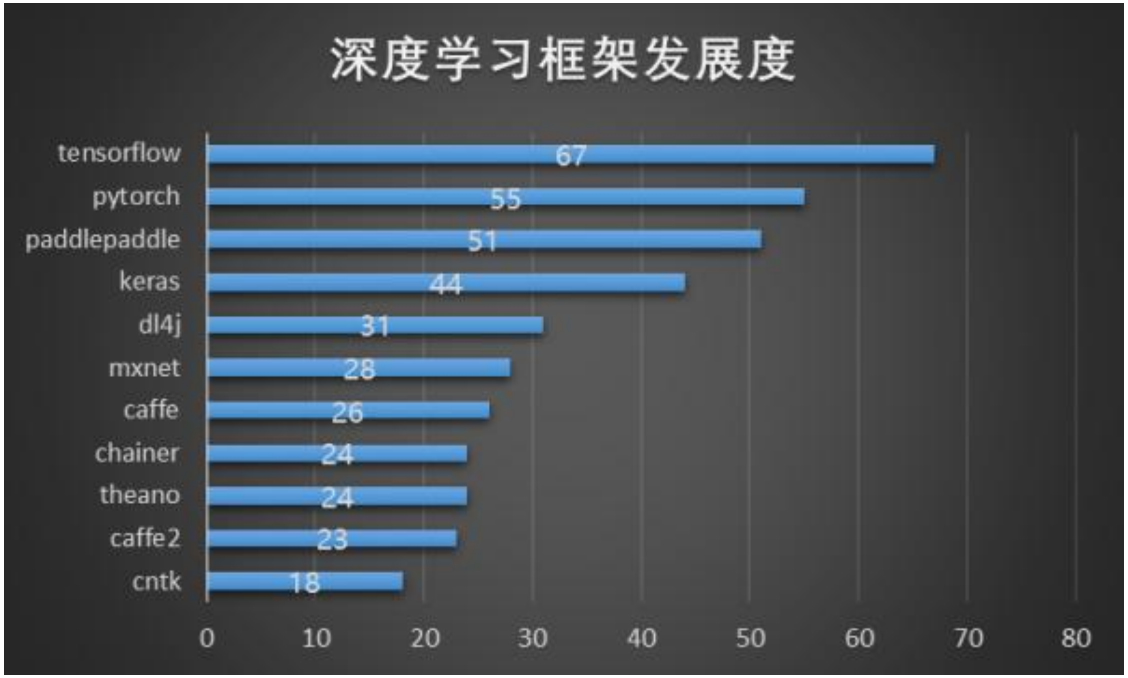
```
[[  9.99998450e-01   1.42261445e-06   1.62947060e-07]
 [  9.99949336e-01   4.81077950e-05   2.52183918e-06]
 [  4.37718809e-05   9.98948872e-01   1.00730266e-03]
 [  4.63805227e-05   9.98428643e-01   1.52486726e-03]
 [  8.70701982e-08   2.18645262e-04   9.99781311e-01]
 [  2.09509579e-07   6.10101502e-04   9.99389648e-01]]
```



附：深度学习框架(开源)

深度学习框架(开源)

十大深度学习框架



了解各个深度学习框架请查阅相关资料

参考文献：

李宏毅课程

http://speech.ee.ntu.edu.tw/~tlkagk/courses_ML16.html

邱锡鹏，《神经网络与深度学习》讲义

车万翔，Deep Learning　Lecture 02: Neural Network

在 此 表 示 感 谢!

中国科学院大学
University of Chinese Academy of Sciences

谢 谢！

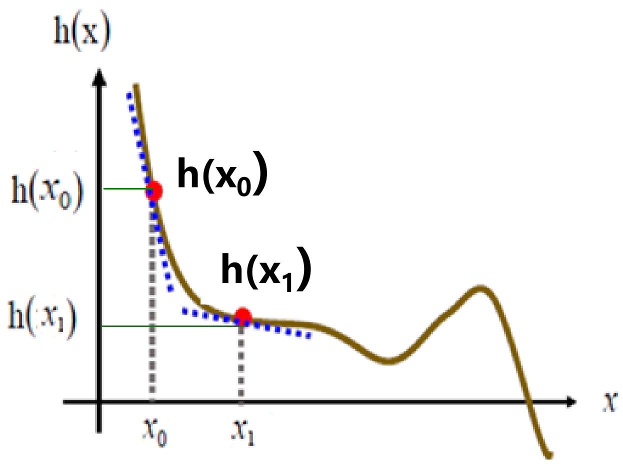
Thank you

附录：《求函数极值基础知识》

函数求极值问题

■ 简单函数求极值问题

设有函数　y=h(x)，求 min h(x)



原理：

泰勒展开：如 h(x) 在 $x=x_0$ 附近无限可微

$$h(x)=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{h^{(k)}(x_0)}{k!}(x-x_0)^k$$

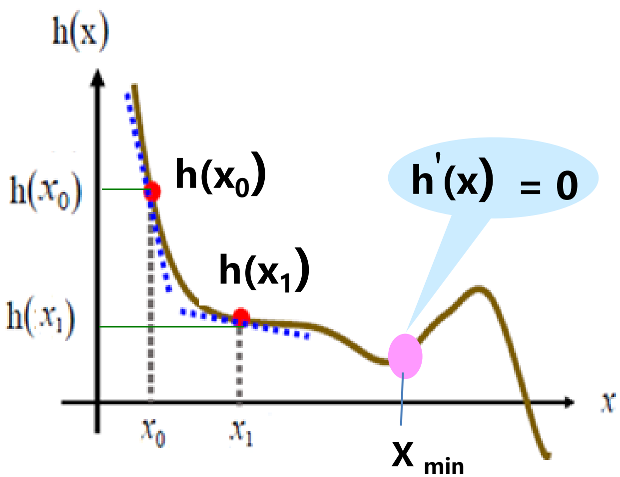
$$=h(x_0)+h'(x_0)(x-x_0)+\frac{h''(x_0)}{2!}(x-x_0)^2+\dots$$

当 x 与 x_0 足够接近时

$$h(x)\approx h(x_0)+h'(x_0)(x-x_0)$$

$$h(x_{i+1}) = h(x_i) + h'(x_i)(x_{I+1} - x_i)$$

函数求极值问题



$h(x_{i+1}) = h(x_i) + h'(x_i)(x_{I+1} - x_i)$

目标：求 h(X) 极小值

每次取X_{i+1}应满足 $h(X_{i+1}) < h(X_i)$

$h(x_{i+1}) - h(x_i) = h'(x_i)(x_{I+1} - x_i) < 0$

即满足 $h'(x_i)(x_{i+1} - x_i) < 0$ 条件

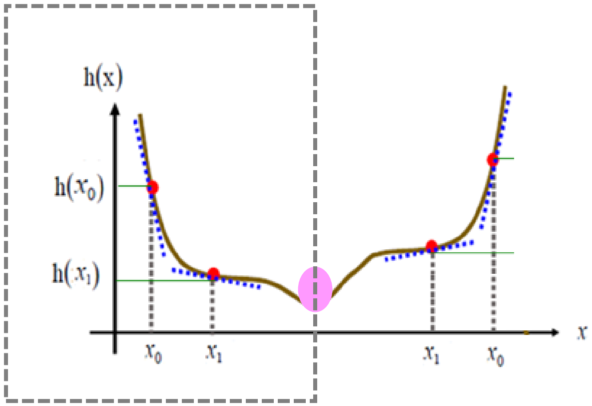
h(X) 将趋于变小

当 $h'(x_i)=0$ 为极值点

每步参数调整

$X_{i+1} = X_i - \eta\, h'(x_i)$

函数求极值问题

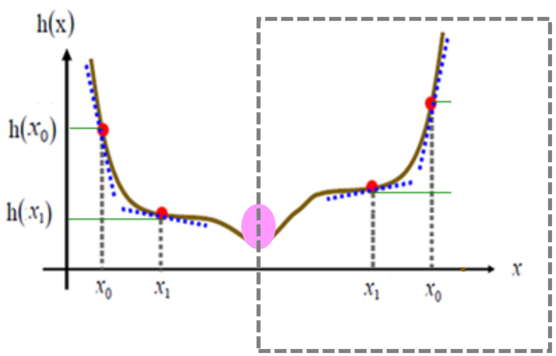


验证

从左向右调整：

$X_1 = X_0 - \eta\, h'(x_0)$

满足 $h'(x_i)(x_{i+1} - x_i) < 0$ 条件



从右向左调整：

$X_1 = X_0 - \eta\, h'(x_0)$

满足 $h'(x_i)(x_{i+1} - x_i) < 0$ 条件

y=h(x)，求 min h(x)

参数调整方法 – 梯度下降：

$$X_{i+1} \leftarrow X_i - \underbrace{\eta}_{\text{学习率}}\, \underbrace{h'(x_i)}_{\text{梯度}}$$

直到 $h'(x_i)=0$

链式法则

■ 复合函数求极值

函数：$y=h(g(x))$ ，求 $\min h(g(x))$

$X_{i+1} \leftarrow X_i - \eta\, h'(g(x_i))$

直到 $h'(g(x_i)) = 0$

$y=h(g(x))$

链式法则：

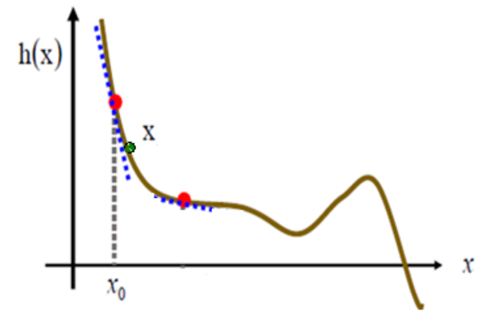
$y = h(z) \quad z = g(x)$

$\Delta x \to \Delta z \to \Delta y$

$$\frac{dy}{dx} = \frac{dy}{dz} \cdot \frac{dz}{dx}$$

简单函数极值

函数：$y=h(x)$，求 $\min h(x)$



$X_{i+1} \leftarrow X_i - \eta\, h'(x_i)$

直到 $h'(x_i)=0$

链式法则

■ 高维参数求极值

函数：y=h(g(x,w)) ，求 min h(g(x,w))

y=h(g(x，w))

$$X_{i+1} \leftarrow X_i - \eta \frac{\partial y}{\partial x}$$

直到 $\frac{\partial y}{\partial x} = 0$

$$w_{i+1} \leftarrow w_i - \eta \frac{\partial y}{\partial w}$$

直到 $\frac{\partial y}{\partial w} = 0$

链式法则：

$$y = h(z) \quad z = g(x, w)$$

$$\Delta x \rightarrow \Delta z \rightarrow \Delta y$$

$$\Delta w \rightarrow \Delta z \rightarrow \Delta y$$

$$\frac{\partial y}{\partial x} = \frac{\partial y}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial x}$$

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

链式法则

■ 复合函数求极值

函数：z=k(g(s),h(s)) ，求 min k(g(s),h(s))

$$s_{i+1} \leftarrow s_i - \eta \frac{\partial z}{\partial s}$$

直到 $\frac{\partial z}{\partial s} = 0$

z=k(g(s),h(s))

链式法则：

$x = g(s) \qquad y = h(s) \qquad z = k(x, y)$

$$\begin{tikzcd} & \Delta x \arrow[dr] & \\ \Delta s \arrow[ur] \arrow[dr] & & \Delta z \\ & \Delta y \arrow[ur] & \end{tikzcd}$$

$$\frac{\partial z}{\partial s} = \frac{\partial z}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial s} + \frac{\partial z}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial s}$$

结论： 对于任意函数$\oint(x_i)$，求 min $\oint(x_i)$

$X_{i+1} \leftarrow X_i - \eta \oint'(x_i)$ 直到 $\oint'(x_i)=0$

附 录 完