机器学习之神经网络bp算法推导

标签： 机器学习 神经网络

2016-05-05 22:30 2868人阅读 评论(6)

分类：
机器学习（7）

这是一篇学习UFLDL反向传导算法的笔记，按自己的思路捋了一遍，有不对的地方请大家指点。

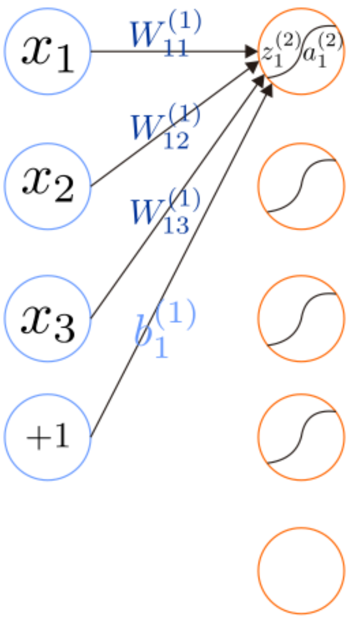
首先说明一下神经网络的符号：

1. n_l 表示神经网络的层数。

2. s_l 表示第 l 层神经元个数，不包含偏置单元。

3. $z_i^{(l)}$ 表示第 l 层第 i 个神经元的输入；$a_i^{(l)}$ 表示第 l 层第 i 个神经元的输出。

4. $W_{ij}^{(l)}$ 表示第 l 层第 j 个神经元连接到第 $l+1$ 层第 i 个神经元的权重，因此权值矩阵 W 的维数为 s_{l+1} x s_l



第二层各神经元的计算方法如下：

最新评论

机器学习之神经网络bp算法推导
hjl240 ：上文确实有个小问题，求和符合的上限应该改为S_nl-1

机器学习之神经网络bp算法推导
Amandayyt ：绝对写的超级棒，终于弄明白了

ubuntu 16.04 无GPU版caffe安装简记
lmkeep ：安装anaconda的话，还用执行楼主贴的第一个部分的代码吗？我看里面的安装Python之类的ana...

机器学习之神经网络bp算法推导
Emma_8 ：多谢，有些地方跟我想的一样，比如前面的参数含义。其他不懂的地方，也得到了更加深刻的理解，多谢博主

机器学习之神经网络bp算法推导
Starry5cm ：总之 谢谢博主的原创文章

机器学习之神经网络bp算法推导
Starry5cm ：定位然后计算倒数第二层即第 nl−1 层第 i 个神经元的残差：倒数第二个等式第二个求和符合的上限S...

机器学习之神经网络bp算法推导
Starry5cm ：然后计算倒数第二层即第 nl−1 层第 i 个神经元的残差：倒数第二个等式没有加上b

ubuntu 16.04 无GPU版caffe安装简记
明明3x ：感谢分享，解决了anaconda下运行make runtest “libhdf5.so.10”的问题

ubuntu 16.04 无GPU版caffe安装简记
Saerdna_pp ：感谢分享，解决了anaconda下运行make runtest “libhdf5.so.10”的问题...

$$
\begin{aligned}
a_1^{(2)} &= f(W_{11}^{(1)}x_1 + W_{12}^{(1)}x_2 + W_{13}^{(1)}x_3 + b_1^{(1)}) \\
a_2^{(2)} &= f(W_{21}^{(1)}x_1 + W_{22}^{(1)}x_2 + W_{23}^{(1)}x_3 + b_2^{(1)}) \\
a_3^{(2)} &= f(W_{31}^{(1)}x_1 + W_{32}^{(1)}x_2 + W_{33}^{(1)}x_3 + b_3^{(1)}) \\
a_4^{(2)} &= f(W_{41}^{(1)}x_1 + W_{42}^{(1)}x_2 + W_{43}^{(1)}x_3 + b_4^{(1)})
\end{aligned}
$$

我们可以将其向量化表示：

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{z}^{(2)} &= W^{(1)}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{b}^{(1)} \\
\boldsymbol{a}^{(2)} &= f(\boldsymbol{z}^{(2)})
\end{aligned}
$$

这里的矩阵W的具体形式为：

$$
W_{4\times 3} = \begin{bmatrix} W_{11}^{(1)} & W_{12}^{(1)} & W_{13}^{(1)} \\ W_{21}^{(1)} & W_{22}^{(1)} & W_{23}^{(1)} \\ W_{31}^{(1)} & W_{32}^{(1)} & W_{33}^{(1)} \\ W_{41}^{(1)} & W_{42}^{(1)} & W_{43}^{(1)} \end{bmatrix}
$$

第2层的神经元个数为4，第1层神经元的个数为3，因此为 4×3 维的矩阵。

代价函数

对于单个样本我们将神经网络的代价函数定义为：

$$
J(W, b; x, y) = \frac{1}{2}\left\|h_{W,b}(x) - y\right\|^2
$$

对所有 K 个样本，神经网络的总的代价函数(这也是批量的由来)为：

$$
\begin{aligned}
J(W,b) &= \left[\frac{1}{K}\sum_{k=1}^{K} J(W, b; x^{(k)}, y^{(k)})\right] + \frac{\lambda}{2}\sum_{l=1}^{nl-1}\sum_{i=1}^{sl}\sum_{j=1}^{sl+1}\left(W_{ji}^{(l)}\right)^2 \\
&= \left[\frac{1}{K}\sum_{k=1}^{K}\left(\frac{1}{2}\left\|h_{W,b}(x^{(k)}) - y^{(k)}\right\|^2\right)\right] + \frac{\lambda}{2}\sum_{l=1}^{nl-1}\sum_{i=1}^{sl}\sum_{j=1}^{sl+1}\left(W_{ji}^{(l)}\right)^2
\end{aligned}
$$

使用批量梯度下降算法寻求神经网络的最优参数

我们使用批量梯度下降算法寻求神经网络的最优参数 $W^{(l)}, b^l$。

我们先来看对于 第 $l+1$ 层第 i 个神经元来说，第 l 层第 j 个神经元的权值可按如下方式迭代更新：

$$
\begin{aligned}
W_{ij}^{(l)} &= W_{ij}^{(l)} - \alpha\frac{\partial}{\partial W_{ij}^{(l)}}J(W,b) \\
&= W_{ij}^{(l)} - \alpha\left[\left(\frac{1}{K}\sum_{k=1}^{K}\frac{\partial}{\partial W_{ij}^{(l)}}J(W,b;x^{(k)},y^{(k)})\right) + \lambda W_{ij}^{(l)}\right]
\end{aligned}
$$

类似的，对于 第 $l+1$ 层第 i 个神经元来说，第 l 层的偏置单元的权值可按如下方式迭代更新：

$$b_i^{(l)} = b_i^{(l)} - \alpha \frac{\partial}{\partial b_i^{(l)}} J(W,b)$$
$$= b_i^{(l)} - \alpha \left[\frac{1}{K} \sum_{k=1}^{K} \frac{\partial}{\partial b_i^{(l)}} J(W,b;x^{(k)},y^{(k)}) \right]$$

我们现在的目的是求出以下两个式子就可以对参数进行迭代了：

$$\frac{\partial}{\partial W_{ij}^{(l)}} J(W,b;x^{(k)},y^{(k)})$$
$$\frac{\partial}{\partial b_i^{(l)}} J(W,b;x^{(k)},y^{(k)})$$

又我们知道第 $l+1$ 层第 i 个神经元的输入 $z_i^{(l+1)}$ 可以由以下式子计算：

$$z_i^{(l+1)} = \sum_{j=1}^{sl} W_{ij}^{(l)} a_j^{(l)} + b_i^{(l)}$$

再进一步的对上面的式子进行变形：

$$\frac{\partial}{\partial W_{ij}^{(l)}} J(W,b;x^{(k)},y^{(k)})$$
$$= \frac{\partial J(W,b;x^{(k)},y^{(k)})}{\partial z_i^{(l+1)}} \cdot \frac{\partial z_i^{(l+1)}}{\partial W_{ij}^{(l)}}$$
$$= \frac{\partial J(W,b;x^{(k)},y^{(k)})}{\partial z_i^{(l+1)}} \cdot a_j^{(l)}$$

同样的，对于 $b_i^{(l)}$的偏导数：

$$\frac{\partial}{\partial b_i^{(l)}} J(W,b;x^{(k)},y^{(k)})$$
$$= \frac{\partial J(W,b;x^{(k)},y^{(k)})}{\partial z_i^{(l+1)}} \cdot \frac{\partial z_i^{(l+1)}}{\partial b_i^{(l)}}$$
$$= \frac{\partial J(W,b;x^{(k)},y^{(k)})}{\partial z_i^{(l+1)}}$$

残差的定义

接下来我们定义：

$$\delta_i^{(l)} = \frac{\partial}{\partial z_i^{(l)}} J(W,b;x^{(k)},y^{(k)})$$

为第k个样本在第l层第i个神经元上产生的残差。再次回顾我们的参数更新公式：

对于 $W_{ij}^{(l)}$ 我们有：

$$
\begin{aligned}
W_{ij}^{(l)} &= W_{ij}^{(l)} - \alpha \frac{\partial}{\partial W_{ij}^{(l)}} J(W,b) \\
&= W_{ij}^{(l)} - \alpha \left[\left(\frac{1}{K} \sum_{k=1}^{K} \frac{\partial}{\partial W_{ij}^{(l)}} J(W,b;x^{(k)},y^{(k)}) \right) + \lambda W_{ij}^{(l)} \right] \\
&= W_{ij}^{(l)} - \alpha \left[\left(\frac{1}{K} \sum_{k=1}^{K} \frac{\partial J(W,b;x^{(k)},y^{(k)})}{\partial z_i^{(l+1)}} \cdot a_j^{(l)} \right) + \lambda W_{ij}^{(l)} \right] \\
&= W_{ij}^{(l)} - \alpha \left[\left(\frac{1}{K} \sum_{k=1}^{K} \delta_i^{(l+1)} \cdot a_j^{(l)} \right) + \lambda W_{ij}^{(l)} \right]
\end{aligned}
$$

类似的，对于 $b_i^{(l)}$ 我们有：

$$
\begin{aligned}
b_i^{(l)} &= b_i^{(l)} - \alpha \frac{\partial}{\partial b_i^{(l)}} J(W,b) \\
&= b_i^{(l)} - \alpha \frac{1}{K} \sum_{k=1}^{K} \frac{\partial}{\partial b_i^{(l)}} J(W,b;x^{(k)},y^{(k)}) \\
&= b_i^{(l)} - \alpha \frac{1}{K} \sum_{k=1}^{K} \frac{\partial J(W,b;x^{(k)},y^{(k)})}{\partial z_i^{(l+1)}} \\
&= b_i^{(l)} - \alpha \frac{1}{K} \sum_{k=1}^{K} \delta_i^{(l+1)}
\end{aligned}
$$

现在的核心问题只剩下一个了，这个残差该如何求？

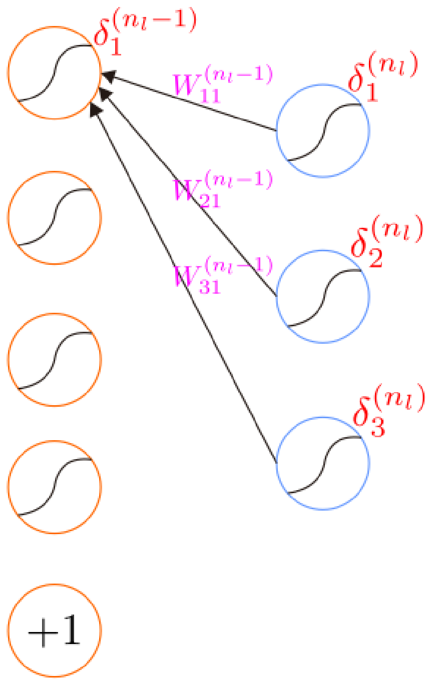
我们先计算最后一层第 i 个神经元上的残差，这里为了简单起见，不再指定为第 k 个样本。

$$
\begin{aligned}
\delta_i^{(nl)} &= \frac{\partial}{\partial z_i^{(nl)}} J(W,b;x,y) \\
&= \frac{\partial}{\partial z_i^{(nl)}} \frac{1}{2} \left\| h_{W,b}(x) - y \right\|^2 \\
&= \frac{\partial}{\partial z_i^{(nl)}} \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{s_{nl}} (y_j - a_j^{(nl)})^2 \\
&= \frac{\partial}{\partial z_i^{(nl)}} \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{s_{nl}} (y_j - f(z_j^{(nl)}))^2 \\
&= -(y_i - f(z_i^{(nl)})) f'(z_i^{(nl)})
\end{aligned}
$$

然后计算倒数第二层即第 $n_l - 1$ 层第 i 个神经元的残差：

$$
\begin{aligned}
\delta_i^{(nl-1)} &= \frac{\partial}{\partial z_i^{(nl-1)}} J(W,b;x,y) \\
&= \frac{\partial}{\partial z_i^{(nl-1)}} \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{s_{nl}} (y_j - a_j^{(nl)})^2 \\
&= \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{s_{nl}} \frac{\partial}{\partial z_i^{(nl-1)}} (y_j - f(z_j^{(nl)}))^2 \\
&= \sum_{j=1}^{s_{nl}} -(y_j - f(z_j^{(nl)})) \frac{\partial}{\partial z_i^{(nl-1)}} f(z_j^{(nl)}) \\
&= \sum_{j=1}^{s_{nl}} -(y_j - f(z_j^{(nl)})) f'(z_j^{(nl)}) \frac{\partial z_j^{(nl)}}{\partial z_i^{(nl-1)}} \\
&= \sum_{j=1}^{s_{nl}} \delta_j^{(nl)} \frac{\partial}{\partial z_i^{(nl-1)}} \sum_{q=1}^{s_{nl}} W_{jq}^{(nl-1)} f(z_q^{(nl-1)}) \\
&= \sum_{j=1}^{s_{nl}} W_{ji}^{(nl-1)} \delta_j^{(nl)} f'(z_i^{(nl-1)})
\end{aligned}
$$

下面是残差传播的示意图：



从这里可以看出紧挨着的两层神经元之间的残差是有关系的，这也是反向传播的由来。更一般的，可以将上述关系表述为：

$$
\delta_i^{(l)} = \sum_{j=1}^{s_{l+1}} W_{ji}^{(l)} \delta_j^{(l+1)} f'(z_i^{(l)})
$$

再再次回顾我们的参数更新公式：

$$
\begin{aligned}
W_{ij}^{(l)} &= W_{ij}^{(l)} - \alpha \left[\left(\frac{1}{K} \sum_{k=1}^{K} \delta_i^{(l+1)} \cdot a_j^{(l)} \right) + \lambda W_{ij}^{(l)} \right] \\
b_i^{(l)} &= b_i^{(l)} - \alpha \frac{1}{K} \sum_{k=1}^{K} \delta_i^{(l+1)}
\end{aligned}
$$

我们需要先计算输出层神经元的残差，然后一级一级的计算前一层的神经元的残差，利用这些残差就可以更新神经网络参数了。

向量化表示

这里我们尝试将上述结果表示成向量或矩阵的形式，比如我们希望能一次性更新某一层神经元的权值和偏置，而不是一个一个的更新。

$\delta_i^{(l+1)}$ 表示的是第 $l+1$ 层第 i 个神经元的残差，那么整个第 $l+1$ 层神经元的偏差是多少呢？

$$\delta_i^{(l+1)} = \sum_{j=1}^{s_{l+2}} W_{ji}^{(l+1)} \delta_j^{(l+2)} f'(z_i^{(l+1)})$$

从而得到：

$$\delta^{(l+1)} = (W^{(l+1)})^T \delta^{(l+2)} \bullet f'(z^{(l+1)})$$

注：这里的 $\bullet$ 是指点乘，即对应元素相乘，$\delta^{(l+1)}$ 是一个 $s_{l+1} \times 1$ 维的列向量。

$a_j^{(l)}$ 表示第 l 层第 j 个神经元的输出，因此整个第 l 层的神经元的输出可用 $a^{(l)}$ 表示，是一个 $s_l \times 1$ 维的列向量。

因此对于矩阵 $W^{(l)}$ 来说，我们记：

$$\nabla_{W^{(l)}} J(W,b;x,y) = \delta^{(l+1)} (a^{(l)})^T$$

我们将 $\Delta W^{(l)}$ 初始化为 0 ，然后对所有 K 个样本将它们的 $\nabla_{W^{(l)}} J(W,b;x,y)$ 累加到 $\Delta W^{(l)}$ 中去：

$$\Delta W^{(l)} := \Delta W^{(l)} + \nabla_{W^{(l)}} J(W,b;x,y)$$

然后更新一次$W^{(l)}$：

$$W^{(l)} = W^{(l)} - \alpha \left[\left(\frac{1}{K} \Delta W^{(l)} \right) + \lambda W^{(l)} \right]$$

这里再强调一下：上式中的 $\Delta W^{(l)}$ 是所有 K 个样本的 $\delta^{(l+1)}(a^{(l)})^T$ **累加**和，如果希望做随机梯度下降了或者是mini-batch，这里就不用把所有样本的残差加起来了。

类似的，令：

$$\nabla_{b^{(l)}} J(W,b;x,y) = \delta^{(l+1)}$$

我们将 $\Delta b^{(l)}$ 初始化为 0 ，然后对所有 K 个样本将它们的 $\nabla_{b^{(l)}} J(W,b;x,y)$ 累加到 $\Delta b^{(l)}$ 中去

$$\Delta b^{(l)} := \Delta b^{(l)} + \nabla_{b^{(l)}} J(W,b;x,y)$$

于是有：

$$b^{(l)} = b^{(l)} - \alpha \left[\frac{1}{K} \Delta b^{(l)} \right]$$

同样的，上式中的 $\Delta b^{(l)}$ 是所有 K 个样本的 $\delta^{(l+1)}$ **累加**和。

小结

上面的推导过程尝试把所有的步骤都写出来了，个人感觉比UFLDL上的教程更为详尽，只要你耐心看总能看得懂的。当然这篇文章有些细节并未作说明，比如惩罚因子的作用，为什么没有对偏置进行规则化，激活函数的选择等，这些都可以在UFLDL中找到答案，对应的链接在下面

出。

参考

[1] 神经网络

[2] 反向传导算法

顶 4　踩 0

- 上一篇　将latex公式转换成图片
- 下一篇　捋一捋AdaBoost（1）：算法实现

相关文章推荐

- 从神经网络到BP算法（纯理论推导）
- BP神经网络算法推导
- 大数据技术实战线上峰会--董西成
- 玩转微信小程序第一篇
- 深度学习BP算法的推导（附加RNN,LSTM的推导...
- BP神经网络：误差反向传播公式的简单推导
- 30天系统掌握机器学习--唐宇迪
- 深度学习案例分享—人脸检测
- 深度学习BP算法的推导（附加RNN,LSTM的推导...
- BP神经网络推导过程详解
- ORACLE数据库学习资料集锦
- BP神经网络公式推导及实现(MNIST)
- BP算法与公式推导
- matlab编写的BP神经网络算法，适合对计算公式...
- PHP从零开始实战篇
- 捋一捋AdaBoost（1）：算法实现

查看评论

hjl240　6楼 前天 17:03发表

引用“u011017860”的评论：

[Ctrl + F] 定位

然后计算倒数第二层即第 nl−1 层第 i 个神经元的残差：

倒数第二个...

上文确实有个小问题，求和符合的上限应该改为S_nl-1

Amandayyt 5楼 2017-08-10 16:17发表

绝对写的超级棒，终于弄明白了

Emma__8 4楼 2017-05-08 21:22发表

多谢，有些地方跟我想的一样，比如前面的参数含义。
其他不懂的地方，也得到了更加深刻的理解，多谢博主

Starry5cm 3楼 2017-02-17 [illegible]

总之 谢谢博主的原创文章

Starry5cm 2楼 2017-02-17 22:24发表

[Ctrl + F] 定位
然后计算倒数第二层即第 nl−1 层第 i 个神经元的残差：
倒数第二个等式第二个求和符合的上限S_nl-1

Starry5cm 1楼 2017-02-17 22:18发表

然后计算倒数第二层即第 nl−1 层第 i 个神经元的残差：
倒数第二个等式没有加上b

您还没有登录,请[登录]或[注册]

* 以上用户言论只代表其个人观点，不代表CSDN网站的观点或立场