HCMUS
Viet Nam National University
Ho Chi Minh City
University of Science

Khoa Toán - Tin học
Fac. of Math. & Computer Science

CHƯƠNG 4

Neural Networks

Lưu Giang Nam

Bộ môn Ứng dụng Tin học
Khoa Toán - Tin học
Trường Đại học KHTN, ĐHQG TPHCM

09/2025

Bối cảnh và vấn đề

- Trong Chương 3–4: xem xét các mô hình hồi quy và phân loại dựa trên tổ hợp tuyến tính của các hàm cơ sở cố định.
- Ưu điểm: giải tích tốt, tính toán thuận lợi.
- Hạn chế: chịu ảnh hưởng của lời nguyền chiều.
- Mạng nơ-ron truyền thẳng (Feed-forward NN)
  - Cố định số lượng hàm cơ sở, nhưng cho phép chúng thích nghi thông qua các tham số huấn luyện.
  - Mô hình thành công nhất: Feed-forward neural network hay Multilayer Perceptron (MLP).
  - Thực chất MLP là chuỗi các mô hình logistic liên tục, không phải các perceptron rời rạc.
  - Ưu điểm: mô hình gọn hơn, tính toán nhanh hơn SVM khi có cùng năng lực tổng quát hóa.

Phần 1

Feed-forward Network

Mô hình tuyến tính cơ sở

- Bắt đầu từ mô hình tuyến tính hồi quy hoặc phân loại:

$$y(x, w) = f\left(\sum_{j=1}^{M} w_j \phi_j(x)\right) \tag{1}$$

- Trong đó:
  - $f(\cdot)$ là hàm kích hoạt (activation function).
  - $\phi_j(x)$ là các hàm cơ sở cố định
- Mục tiêu: mở rộng mô hình bằng cách cho phép $\phi_j(x)$ phụ thuộc tham số, huấn luyện cùng w_j
- Neural Network: mỗi $\phi_j(x)$ là một hàm phi tuyến của tổ hợp tuyến tính các đầu vào (inputs) với trọng số (weights) và độ lệch (bias).

Hàm kích hoạt

- Ở mỗi tầng ẩn (hidden unit) ta định nghĩa a_j:

$$a_j = \sum_{i=1}^{D} w_{ji}^{(1)} x_i + w_{j0}^{(1)}, \quad j = 1, \ldots, M \tag{2}$$

- Từ dạng linear ta chuyển qua dạng phi tuyến qua thông qua hàm kích hoạt (khả vi, phi tuyến) ta được hàm:

$$z_j = h(a_j) \tag{3}$$

- Các hàm kích hoạt phổ biến:
  - Logistic sigmoid: $\sigma(a) = \frac{1}{1+\exp(-a)}$
  - Tanh: $h(a) = \tanh(a)$
- Chức năng:
  - Tạo phi tuyến giữa input và output
  - Đảm bảo khả vi

Lớp đầu ra

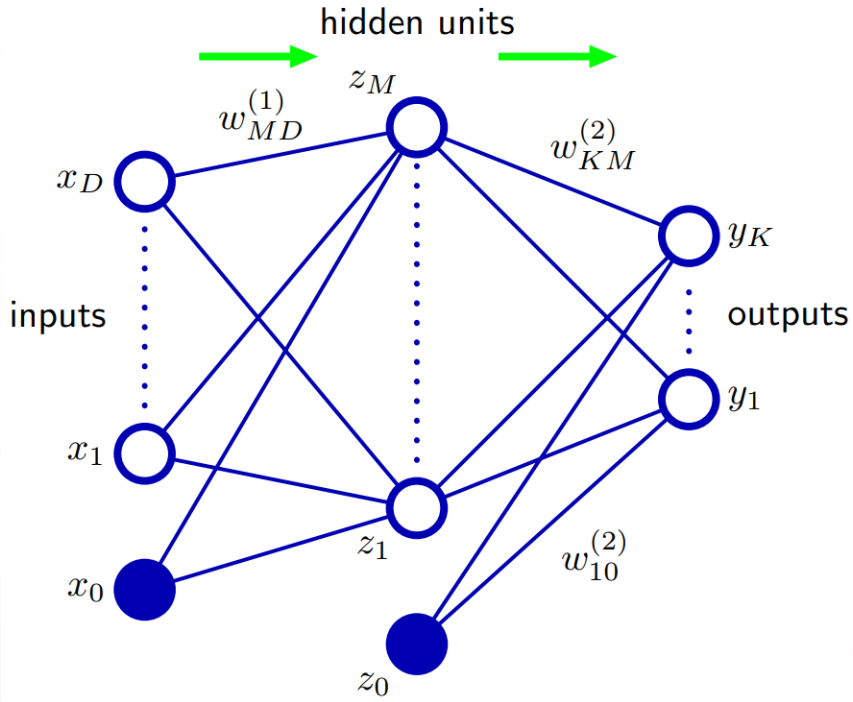
- Tầng đầu ra (output) với giá trị kích hoạt đầu ra ở tầng thứ 2:

$$a_k = \sum_{j=1}^{M} w_{kj}^{(2)} z_j + w_{k0}^{(2)}, \quad k = 1, \ldots, K$$

- Cuối cùng, các kích hoạt đầu ra được biến đổi bằng cách sử dụng hàm kích hoạt thích hợp để đưa ra một tập hợp các đầu ra y_k.
  - Regression: identity, $y_k = f(a_k) = a_k$
  - Binary classification: sigmoid, $y_k = f(a_k) = \sigma(a_k)$
  - Multiclass: softmax, $y_k = f(a_k) = \text{softmax}(a_k)$
- Lan truyền thuận: tuần tự từ input $\rightarrow$ hidden $\rightarrow$ output

$$y_k(x, w) = f\left(\sum_{j=0}^{M} w_{kj}^{(2)} h\left(\sum_{i=0}^{D} w_{ji}^{(1)} x_i + w_{j0}^{(1)}\right) + w_{k0}^{(2)}\right) \quad (4)$$

Sơ đồ mạng cho mạng nơ-ron hai lớp



Hình: Các biến đầu vào, biến ẩn và biến đầu ra được biểu diễn bằng các nút, và các trọng số được biểu diễn bằng các liên kết giữa các nút, trong đó các tham số độ lệch được biểu thị bằng các liên kết đến từ các biến đầu vào và biến ẩn bổ sung x_0 và z_0. Các mũi tên biểu thị hướng của luồng thông tin qua mạng trong quá trình lan truyền thuận (forward propagation).

Bài tập 1

Câu hỏi

Với điều kiện $x_0 = 1$, hãy biểu diễn a_j và $y_k(x, w)$ theo dạng sau:

$$a_j = \sum_{i=0}^{D} w_{ji}^{(1)} x_i, \quad y_k(x, w) = \sigma\left(\sum_{j=0}^{M} w_{kj}^{(2)} h\left(\sum_{i=0}^{D} w_{ji}^{(1)} x_i\right)\right) \tag{5}$$

- Lợi ích:
  - Viết gọn công thức
  - Chuẩn hóa forward propagation

MLP và kiến trúc mạng

- Hai tầng = Multilayer Perceptron (MLP)
- Hidden units liên tục, khả vi $\rightarrow$ hỗ trợ gradient-based training
- Linear hidden units $\rightarrow$ khả năng xấp xỉ hạn chế
- Nonlinear hidden units: $\rightarrow$ xấp xỉ mọi hàm liên tục trên miền compact. Số lượng hidden units quyết định độ chính xác
- Mỗi hidden unit: tính tuyến tính $\rightarrow$ phi tuyến $\rightarrow$ chuyển sang tầng đầu ra.
- Feed-forward: không có cycles, đảm bảo output xác định
- Mạng có thể mở rộng:
  - Thêm layers
  - Skip connections (input $\rightarrow$ output)
  - Sparse connections

Vai trò hidden units

- Hidden units trích xuất đặc trưng phi tuyến
- Hợp tác để xấp xỉ hàm mục tiêu
- Cấu trúc hai tầng + nonlinear hidden units $\rightarrow$ xấp xỉ nhiều hàm phức tạp
- Thách thức: tìm tập tham số w tối ưu từ dữ liệu huấn luyện
- Giải pháp:
  - Maximum likelihood
  - Bayesian approach
- Mở rộng: Skip-layer connections, sparse connections
- Có thể thêm layers $\rightarrow$ deep network nhưng luôn tuân thủ feed-forward $\rightarrow$ output xác định
- Mỗi unit:

$$z_k = h\left(\sum_j w_{kj} z_j\right) \tag{6}$$

Phần 2

Huấn luyện mô hình

Giới thiệu

- Neural network là một lớp hàm phi tuyến tham số từ input vector $x \rightarrow$ output vector y
- Mục tiêu: tìm các tham số w sao cho mạng mô hình hóa tốt dữ liệu huấn luyện
- Phương pháp đơn giản: Cực tiểu hóa tổng bình phương lỗi:

$$E(w) = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N} \|y(x_n, w) - t_n\|^2$$

- Nhưng cách tiếp cận tổng quát hơn là dùng góc nhìn xác suất cho outputs. Làm rõ ràng hơn cho cả việc lựa chọn tính phi tuyến tính của output unit và lựa chọn hàm lỗi.

Probabilistic Interpretation - Regression

- Giả sử một target $t \in \mathbb{R}$ có phân phối Gaussian với

$$p(t|x, w) = \mathcal{N}(t|y(x, w), \beta^{-1}) \tag{7}$$

- $\beta =$ đô chính xác (precision hay inverse variance) của nhiễu Gauss.
- Đối với phân phối có điều kiện được cho bởi (7), chỉ cần lấy hàm kích hoạt đơn vị đầu ra là đồng nhất thức, vì một mạng như vậy có thể xấp xỉ bất kỳ hàm liên tục nào từ x đến y.
- Cho một tập dữ liệu gồm N quan sát độc lập, phân phối đồng nhất $X = \{x_1, ..., x_N\}$, cùng với các giá trị mục tiêu tương ứng $t = \{t_1, ..., t_N\}$ ta có thể xây dựng được likelihood cho toàn bộ dataset:

$$p(t|X, w, \beta) = \prod_{n=1}^{N} p(t_n|x_n, w, \beta) \tag{8}$$

Bài tập 2:

Câu hỏi

1. Chứng minh hàm sai số (error function) được cho bằng hàm đối của log-likelikelihood là (với w và β là các tham số):

$$\frac{\beta}{2}\sum_{n=1}^{N}\{y(x_n, w) - t_n\}^2 - \frac{N}{2}\ln\beta + \frac{N}{2}\ln(2\pi) \qquad (9)$$

2. Sau khi tìm được w_{ML}, giá trị của β có thể được tìm thấy bằng cách tương tự.

$$\frac{1}{\beta_{ML}} = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\{y(x_n, w_{ML}) - t_n\}^2 \qquad (10)$$

Nhiễn biến mục tiêu

- Giả sử K biến mục tiêu (independent conditionally) trên x và w, khi đó ta xét:

$$p(t|x,w) = \mathcal{N}(t|y(x,w), \beta^{-1}I) \tag{11}$$

- Khi đó để tối đại likelihood ta sẽ tối tiểu $E(w)$:

$$E(w) = \frac{1}{2}\sum_{n=1}^{N}\sum_{k=1}^{K}\{y_k(x_n,w) - t_{nk}\}^2 \tag{12}$$

với

$$\frac{1}{\beta_{ML}} = \frac{1}{NK}\sum_{n=1}^{N}\sum_{k=1}^{K}\{y_k(x_n,w_{ML}) - t_{nk}\}^2 \tag{13}$$

Với hàm đơn nhất

- Nếu Output activation = identity, tức là $y_k = a_k$
- Ta sẽ có:

$$\frac{\partial E}{\partial a_k} = y_k - t_k \tag{14}$$

- Tương thích tự nhiên giữa output activation và error function
- Max likelihood $w \leftrightarrow$ minimize $E(w)$:

$$E(w) = \frac{1}{2}\sum_{n=1}^{N}\{y(x_n, w) - t_n\}^2 \tag{15}$$

- Nonlinear network $\rightarrow$ E(w) nonconvex $\rightarrow$ local minima

Với phân loại nhị phân

- Với hàm mục tiêu đơn biến t: lớp C_1 gán $t = 1$, lớp C_2 gán $t = 0$.
- Sử dụng kích hoạt cho hàm đầu ra là hàm logistic sigmoid:

$$y = \sigma(a) = \frac{1}{1 + \exp(-a)} \tag{16}$$

- Khi đó ta có $0 \leq y(x, w) \leq 1$ và $y(x, w) = p(C_1|x)$, $p(C_2|x) = 1 - y(x, w)$.
- Khi đó phân phối của điều kiện của biến mục tiêu sẽ tuân theo phân phối Bernoulli

$$p(t|x, w) = y(x, w)^t \{1 - y(x, w)\}^{1-t} \tag{17}$$

Cross-entropy

- Khi đó, sử dụng "negative log-likelihood" ta sẽ được một hàm lỗi được gọi là "cross-entropy":

$$E(w) = -\sum_{n=1}^{N}\{t_n \ln y_n + (1 - t_n)\ln(1 - y_n)\} \qquad (18)$$

- Không có noise precision β
- Ưu điểm: huấn luyện nhanh hơn, tổng quát hóa tốt hơn.

Cross-entropy

Đối với bài toán đa biến (K biến) ta đơn giản là tích (K) hàm sigmoid lại:

$$p(\mathbf{t}|\mathbf{x},\mathbf{w}) = \prod_{k=1}^{K} y_k^{t_k}(\mathbf{x},\mathbf{w})(1 - y_k(\mathbf{x},\mathbf{w}))^{1-t_k} \qquad (19)$$

Sử dụng "negative log-likelihood" để chứng minh hàm lỗi $E(\mathbf{w})$ sẽ có dạng:

$$E(\mathbf{w}) = -\sum_{n=1}^{N}\sum_{k=1}^{K}\{t_{nk} \ln y_{nk} + (1 - t_{nk}) \ln(1 - y_{nk})\} \qquad (20)$$

với $y_{nk} = y_K(\mathbf{x}_n, \mathbf{w})$

Phần 2

Huấn luyện mô hình

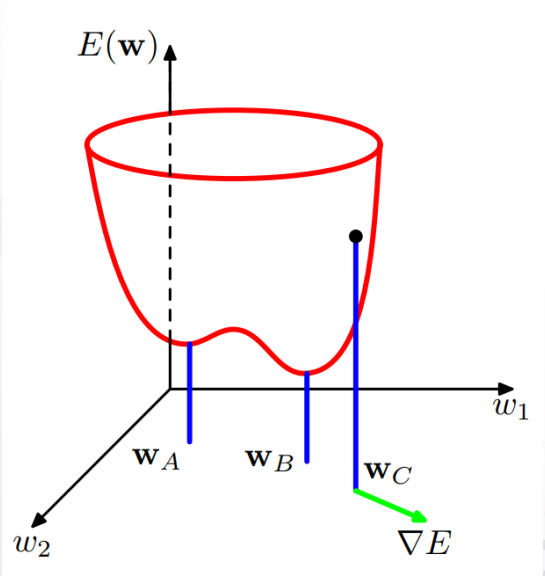
Mục 1: Tối ưu tham số

Giới thiệu

- Mục tiêu: tìm vector trọng số w để **minimize** hàm lỗi $E(w)$.
- Phương pháp được sử dụng ở đây sẽ là cập nhập các trọng số để hội tụ về giá trị cực trị:

$$w \to w + \delta w, \quad \delta E \simeq \delta w^T \nabla E(w) \tag{21}$$

với vector $\nabla E(w)$ chỉ hướng tăng nhanh nhất của $E(w)$.



Hình: Điểm w_A là một điểm cực tiểu cục bộ và w_B là điểm cực tiểu toàn cục. Điểm w_C và vectơ $\nabla E(w)$ ứng với điểm này.

Điều kiện cực trị của hàm lỗi

- Các điểm mà $\nabla E(w) = 0$ gọi là **stationary points**.
- Phân loại:
- Trong mạng nơ-ron, $E(w)$ thường **phi tuyến mạnh** $\rightarrow$ có nhiều điểm dừng.
- $E(w)$ có thể có nhiều cực tiểu không tương đương:

$$E(w_{\text{local}}) > E(w_{\text{global}}) \tag{22}$$

- Trong thực tế, ta không cần tìm chính xác global minimum $\rightarrow$ tìm nghiệm tốt (local minimum "đủ tốt") có khả năng tổng quát hóa tốt.

Thuật toán tối ưu lặp

- Trong giải tích, việc tìm nghiệm chính xác của phương trình $\nabla E(w) = 0$ là không thể $\rightarrow$ dùng **thuật toán lặp**.
- Công thức cập nhật tổng quát:

$$w^{(\tau+1)} = w^{(\tau)} + \Delta w^{(\tau)} \tag{23}$$

- Sau mỗi bước, tính lại gradient tại $w^{(\tau+1)}$.
- Các thuật toán khác nhau ở cách chọn $\Delta w^{(\tau)}$.

Phần 2

Huấn luyện mô hình

Mục 2: Xấp xỉ bậc hai cục bộ

Local Quadratic Approximation

- Gần một điểm w_b, khai triển Taylor bậc hai:

$$E(w) \simeq E(w_b) + (w - w_b)^T b + \frac{1}{2}(w - w_b)^T H(w - w_b) \quad (24)$$

với:

$$b = \nabla E|_{w=w_b}, \quad H = \nabla\nabla E|_{w=w_b} = \frac{\partial E}{\partial w_i \partial w_j}|_{w=w_b}$$

- Đây là xấp xỉ bậc hai của $E(w)$ quanh w_b. Khi đó gradient tương ứng:

$$\nabla E \simeq b + H(w - w_b) \quad (25)$$

- Nếu w_b là điểm cực tiểu $\rightarrow b = 0$:

$$E(w) = E(w_b) + \frac{1}{2}(w - w_b)^T H(w - w_b) \quad (26)$$

Giá trị riêng và hình dạng bề mặt lỗi

- Giải phương trình riêng của ma trận Hessian H:

$$Hu_i = \lambda_i u_i, \quad u_i^T u_j = \delta_{ij} \tag{27}$$

- Bây giờ chúng ta viết lại $(w - w_b)$ thành một tổ hợp tuyến tính của các vectơ riêng dưới dạng: $w - w_b = \sum_i \alpha_i u_i$.

Câu hỏi

Thay vào chứng minh $E(w)$ có dạng:

$$E(w) = E(w_b) + \frac{1}{2}\sum_i \lambda_i \alpha_i^2 \tag{28}$$

Câu hỏi

Khi đó các $\lambda_i > 0$ ta sẽ có ma trận Hessian H là **positive definite**. Chứng minh w_b là cực tiểu.

Phần 2

Huấn luyện mô hình

Mục 3: Tối ưu gradient descent

Batch Version

- Quy tắc cập nhật cơ bản:

$$w^{(\tau+1)} = w^{(\tau)} - \eta \nabla E(w^{(\tau)})$$

- $\eta > 0$: learning rate (bước nhảy).
- Mỗi bước cần duyệt qua toàn bộ training set.
- Gọi là batch gradient descent.
- Nhược điểm của Gradient Descent: Dễ dao động khi hàm lỗi có độ cong khác nhau. Dễ mắc kẹt trong local minima (hoặc plateau).
- Cần chọn η phù hợp:
  - η quá nhỏ $\rightarrow$ hội tụ chậm.
  - η quá lớn $\rightarrow$ dao động, không hội tụ.
- Các phương pháp hiệu quả hơn: **Conjugate Gradient**, **Quasi-Newton**.

On-line (Stochastic) Gradient Descent[1]

- Hàm lỗi toàn bộ:

$$E(w) = \sum_{n=1}^{N} E_n(w) \tag{29}$$

- Cập nhật theo từng mẫu:

$$w^{(\tau+1)} = w^{(\tau)} - \eta \nabla E_n(w^{(\tau)}) \tag{30}$$

- Mỗi bước chỉ dùng một điểm dữ liệu.
- Còn gọi là **stochastic gradient descent (SGD)**.
- Ưu điểm của On-line Learning
  1. Xử lý tập dữ liệu lớn hiệu quả hơn.
  2. Có khả năng thoát khỏi local minima do nhiễu trong cập nhật.
  3. Có thể cập nhật liên tục khi có dữ liệu mới.

[1] Le Cun, et al. (1989). Backpropagation applied to handwritten zip code recognition. Neural Computation 1(4), 541–551.

Phần 3

Error Backpropagation

Giới thiệu Error Backpropagation

- Ý tưởng chính: truyền thông tin luân phiên theo hai hướng:
  - Forward: tính các activation.
  - Backward: lan truyền sai số để tính gradient.
- Thuật toán gọi là error backpropagation hay backprop. Cần phân biệt 2 giai đoạn:
  1. **Giai đoạn 1**: tính đạo hàm $\nabla E(\mathbf{w})$ bằng lan truyền lỗi ngược (backpropagation).
  2. **Giai đoạn 2**: cập nhật trọng số bằng thuật toán tối ưu (SGD, momentum, Adam...).
- Backpropagation chỉ là giai đoạn tính đạo hàm.

Ví dụ khởi đầu

- Trước tiên hãy xem xét một mô hình tuyến tính đơn giản trong đó các đầu ra y_k là các tổ hợp tuyến tính của các biến đầu vào x_i sao cho $y_k = \sum_i w_{ki} x_i$ cùng với một hàm lỗi có dạng.

$$E_n = \frac{1}{2} \sum_k (y_k - t_k)^2 \tag{31}$$

với $y_{nk} = y_k(\mathbf{x}_n, \mathbf{w})$.

- Độ dốc (gradient) của hàm lỗi này đối với trọng số w_{ji} được cho bởi

$$\frac{\partial E_n}{\partial w_{ji}} = (y_{nj} - t_{nj}) x_{ni} \tag{32}$$

- Đây là trường hợp đơn giản: gradient là tích của lỗi tại đầu ra và giá trị tại đầu vào.

Mạng nhiều lớp

Mỗi nút j trong mạng tính tổng có trọng số:

$$a_j = \sum_i w_{ji} z_i$$

- z_i: đầu vào nối đến nút j.
- w_{ji}: trọng số của kết nối từ $i \to j$.

Hàm kích hoạt của nút j: $z_j = h(a_j)$ trong đó $h(\cdot)$ là hàm phi tuyến (sigmoid, tanh, ReLU, ...). Với mỗi mẫu trong tập huấn luyện:

- Truyền toàn bộ vector đầu vào qua các tầng.
- Tính tuần tự (a_j, z_j) nhờ hai công thức trên.
- Thông tin đi theo hướng từ input $\to$ hidden $\to$ output.

Vì E_n (lỗi ứng với mẫu thứ n) phụ thuộc vào trọng số w_{ji} **chỉ thông qua** a_j, ta áp dụng quy tắc chuỗi:

$$\frac{\partial E_n}{\partial w_{ji}} = \frac{\partial E_n}{\partial a_j}\frac{\partial a_j}{\partial w_{ji}}$$

Do

$$a_j = \sum_i w_{ji} z_i \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial a_j}{\partial w_{ji}} = z_i,$$

nên đạo hàm trở thành:

$$\frac{\partial E_n}{\partial w_{ji}} = \frac{\partial E_n}{\partial a_j} z_i = \delta_j . z_i$$

(Công thức này là nền tảng của thuật toán lan truyền ngược.)

Công thức tính δ_k và δ_j

Công thức đơn giản nhờ đạo hàm của hàm lỗi và hàm kích hoạt triệt tiêu nhau. Dùng quy tắc chuỗi để truyền lỗi ngược:

$$\delta_j \equiv \frac{\partial E_n}{\partial a_j} = \sum_k \frac{\partial E_n}{\partial a_k} \frac{\partial a_k}{\partial a_j}$$

Thay định nghĩa δ_k và đạo hàm của tổng trọng số ta có:

$$a_k = \sum_j w_{kj} z_j \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial a_k}{\partial a_j} = w_{kj}\, h'(a_j)$$

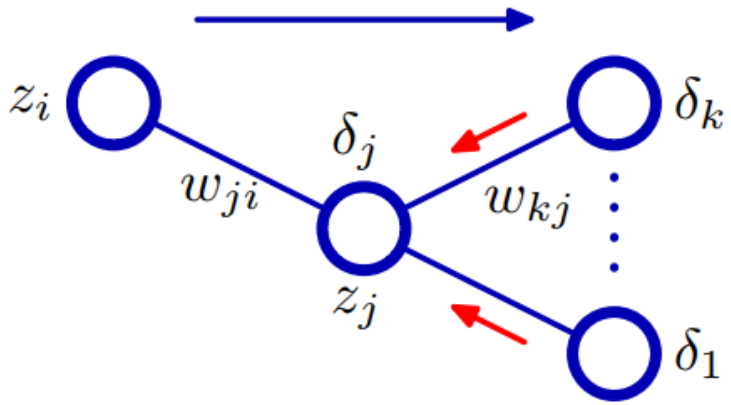
Suy ra công thức lan truyền ngược tổng quát:

$$\delta_j = h'(a_j) \sum_k w_{kj}\, \delta_k$$

Lan truyền ngược

Ý nghĩa:

- Lỗi được truyền ngược qua các trọng số w_{kj}.
- Nhân với đạo hàm của hàm kích hoạt $h'(a_j)$ để đo độ nhạy của nút j.
- Biết δ_k của tầng sau $\rightarrow$ tính được δ_j của tầng trước.



Hình: Minh họa phép tính δ_j cho đơn vị ẩn j bằng cách lan truyền ngược các δ từ các đơn vị k mà đơn vị j gửi kết nối đến. Mũi tên màu xanh biểu thị hướng của luồng thông tin trong quá trình lan truyền thuận, và các mũi tên màu đỏ biểu thị sự lan truyền ngược.

Mục tiêu của Backpropagation

Mục tiêu của thuật toán backpropagation là tính gradient của hàm mất mát (loss) theo các tham số của mạng. Khi đã có gradient, ta có thể **điều chỉnh các trọng số** theo hướng làm giảm giá trị loss, và lặp lại quá trình cho đến khi việc cải thiện không còn đáng kể.

Ôn lại khái niệm gradient: Cho một hàm

$$f : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}, \quad \text{với } x = [x_1, x_2, \ldots, x_N],\ y = f(x), \tag{33}$$

gradient của y theo x, ký hiệu $\nabla_x y$, được định nghĩa là vectơ đạo hàm riêng:

$$\nabla_x y = \left[\frac{\partial y}{\partial x_1}, \frac{\partial y}{\partial x_2}, \ldots, \frac{\partial y}{\partial x_N}\right]. \tag{34}$$

Ý nghĩa gradient

Ý nghĩa: Gradient chỉ ra **hướng tăng nhanh nhất** của $f(x)$; do đó để tối ưu giảm loss, ta dịch tham số theo hướng ngược chiều gradient.

Câu hỏi

Ta có thể cho hàm f là hàm mất mát, ví dụ như mất mát lỗi bình phương, được ký hiệu là L. Mất mát này là một hàm có giá trị vô hướng của đầu ra:

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

Ta chứng minh được $\nabla_{\mathbf{y}} L = 2(\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}})$.

Ma trận Jacobian cho hàm nhiều chiều

Xét hàm ánh xạ nhiều chiều: $f : \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^n, \qquad y = f(x).$
Khi đó, **Jacobian** của y theo x, ký hiệu $J_x(y)$, là ma trận đạo hàm riêng:

$$\mathbf{J}_\mathbf{x}(\mathbf{y}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial y_1}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial y_n}{\partial x_1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial y_1}{\partial x_m} & \cdots & \frac{\partial y_n}{\partial x_m} \end{bmatrix}. \tag{35}$$

Jacobian là mở rộng của gradient cho hàm vector–vector. Với $\mathbf{y} = g(\mathbf{x})$ và $\mathbf{z} = f(\mathbf{y})$:

$$\nabla_\mathbf{x} z = J_\mathbf{x}(y)\, \nabla_\mathbf{y} z.$$

Nếu $\mathbf{z} = f(\mathbf{u}, \mathbf{v})$ với $\mathbf{u} = g(\mathbf{x})$ và $\mathbf{v} = h(\mathbf{x})$:

$$\nabla_\mathbf{x} z = J_\mathbf{x}(u)\, \nabla_\mathbf{u} z \; + \; J_\mathbf{x}(v)\, \nabla_\mathbf{v} z.$$

Ví dụ với hàm Sigmoid

Ta sẽ tính:

$$g(\mathbf{v}) = \nabla_{\mathbf{v}}(\mathbf{L}) = \mathbf{J}_{\mathbf{v}}(\mathbf{y})\nabla_{\mathbf{y}}(\mathbf{L}) = \mathbf{J}_{\mathbf{v}}(\mathbf{y})g(\mathbf{y}) \tag{36}$$

Với $y = \sigma(v)$ là hàm Sigmoid nên ta có:

$$\frac{\partial y_i}{\partial v_j} = \begin{cases} y_i(1 - y_i), & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases}$$

Do đó Jacobian:

$$J_{\mathbf{v}}(\mathbf{y}) = \mathrm{diag}(y_1(1 - y_1), \ldots, y_n(1 - y_n))$$

Gọi $\mathbf{s} = [y_i(1 - y_i)]$, ta có:

$$g(\mathbf{v}) = J_{\mathbf{v}}(\mathbf{y})g(\mathbf{y}) = \mathbf{s} \circ g(\mathbf{y})$$

Ví dụ với hàm Sigmoid

Xét chuỗi các phép biến đổi:

$$u = Wx, \quad v = u + b, \quad y = \sigma(v), \quad L = L(y)$$

Do $v = u + b \Rightarrow J_u(v) = J_b(v) = I_n$, suy ra:

$$g(u) = g(v), \qquad g(b) = g(v)$$

Ta có: $u = Wx$ hay $u_i = w_i^T x$. Vì u_j không phụ thuộc w_i với $j \neq i$:

$$\frac{\partial u_j}{\partial w_i} = \begin{cases} x, & j = i \\ 0, & j \neq i \end{cases}$$

Nên Jacobian chỉ có một cột khác 0:

$$J_{w_i}(u) = \begin{bmatrix} 0 & \dots & x & \dots & 0 \end{bmatrix}^T$$

Gradient cuối cùng: $g(w_i) = g(u_i)\, x$.

Softmax kết hợp Cross-Entropy

Trong mạng nơ-ron phân loại, tầng cuối thường dùng:

$$\mathbf{q} = \mu(\mathbf{y}) \quad \text{(softmax)} \tag{37}$$

$$l = H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = -\sum_i p_i \log(q_i) \quad \text{(cross-entropy)} \tag{38}$$

với y là đầu vào softmax, q là xác suất dự đoán, p là phân phối thật.

Câu hỏi

Tính log của softmax và sau đó chứng minh:

$$l = -\sum_i p_i y_i - \log \sum_j e^{y_j}$$

Ý nghĩa: Cross-entropy + softmax rút gọn thành dạng rất thuận lợi để vi phân.

Softmax kết hợp Cross-Entropy

Câu hỏi

Từ đó chứng minh:

$$\frac{\partial l}{\partial y_k} = -p_k + q_k, \quad \text{và} \quad \nabla_y l = q - p$$

Đặc điểm quan trọng:

- Gradient **không bị bão hòa** (vanish) như sigmoid/tanh.
- Gradient **không bùng nổ** nhờ cấu trúc chuẩn hóa của softmax.
- Học ổn định và nhanh — lý do softmax + cross-entropy được dùng gần như mặc định.

Ý nghĩa trực quan: Gradient bằng **(dự đoán) – (sự thật)**: mô hình học bằng cách kéo xác suất về gần phân phối thật.

Đề bài

Cho mạng nơ-ron:

- Input: $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^4$
- Hidden: $\mathbf{z} \in \mathbb{R}^2$, $\mathbf{a} = \mathbf{W_1 x} + b_1$, $\mathbf{z} = \tanh(\mathbf{a})$.
- Output: $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^3$, $\mathbf{y} = \mathbf{W_2 z} + b_2$ (identity).
- Loss: $\mathcal{L} = \frac{1}{3}\|\mathbf{y} - \widehat{\mathbf{y}}\|^2$

Yêu cầu:

a) Tính $J_y(z)$.

b) Tính $J_z(x)$.

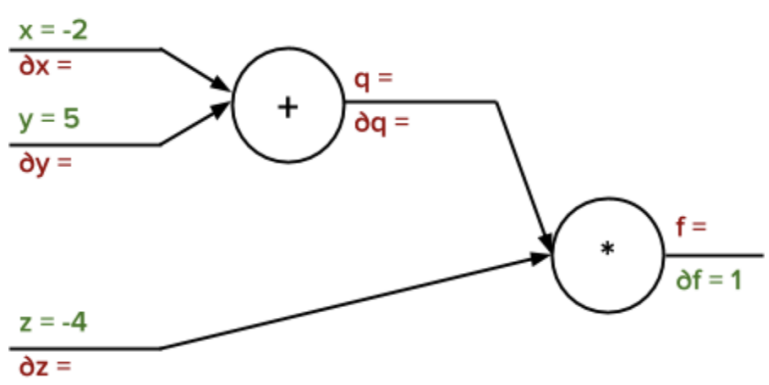
c) Biểu diễn $g(x)$ theo $g(\tanh(z))$.

d) Biểu diễn $g(x)$ theo hàm mất mát.

e) Vẽ compute graph kèm lan truyền gradient.

Đề bài 1

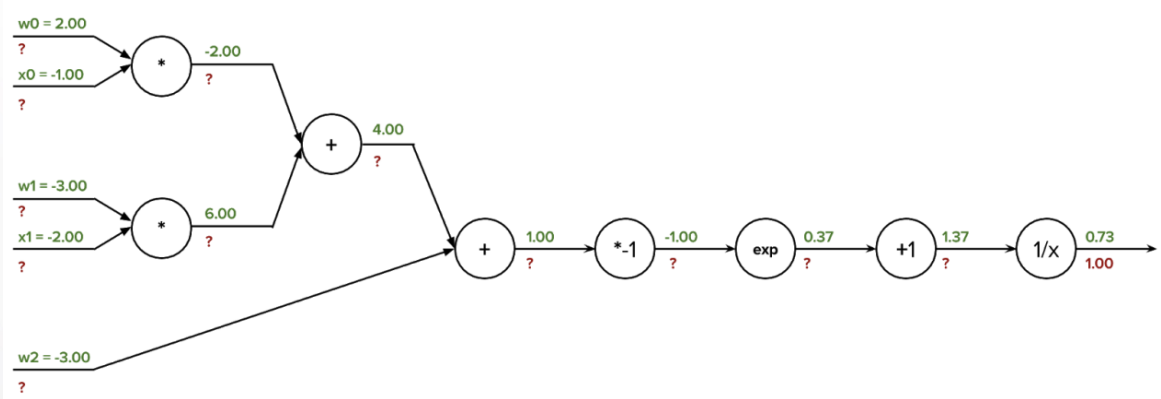
Giả sử chúng ta có một hàm số đơn giản $f(x, y, z) = (x + y)z$. Ta có thể chia hàm số này thành các phương trình $q = x + y$ và $f(x, y, z) = q(x, y)z$. Biểu diễn phương trình này dưới dạng đồ thị tính toán:



Bây giờ, giả sử chúng ta đang đánh giá hàm này tại $x = -2$, $y = 5$ và $z = -4$ và giá trị của $\delta L/\delta f = 1$. Tính các giá trị sau: $\frac{\partial f}{\partial q}, \frac{\partial q}{\partial x}, \frac{\partial q}{\partial y}, \frac{\partial f}{\partial z}, \frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f}{\partial y}$.

Đề bài 2

Hãy thực hiện lan truyền ngược qua một mạng nơ-ron với kích hoạt sigmoid. Cụ thể, chúng ta sẽ định nghĩa giá trị kích hoạt trước $z = w_o x_o + w_1 x_1 + w_2$ và định nghĩa giá trị kích hoạt $s = \sigma(z) = \frac{1}{1 + e^{-z}}$. Đồ thị tính toán được hiển thị bên dưới:



Hãy tính: $\frac{\partial s}{\partial x_0}, \frac{\partial s}{\partial w_0}, \frac{\partial s}{\partial x_1}, \frac{\partial s}{\partial w_1}, \frac{\partial s}{\partial w_2}$.

Đề bài 2

Giả sử chúng ta có một mạng nơ-ron hai lớp, như được định nghĩa bên dưới:

$$z_1 = W_1 x^{(i)} + b_1, \quad a_1 = ReLU(z_1)$$
$$z_2 = W_2 a_2 + b_2, \quad \hat{y}^{(i)} = \sigma(z_2)$$
$$L^{(i)} = y^{(i)} \log\left(\hat{y}^{(i)}\right) + (1 - y^{(i)}) \log\left(1 - \hat{y}^{(i)}\right)$$
$$J = \frac{-1}{m} \sum_{i=1}^{m} L^{(i)}$$

với $x^{(i)}$ có kích thước $D_x \times 1$, $y^{(i)}$ là một số vô hướng. Có m ví dụ trong tập dữ liệu của chúng ta. Chúng ta sẽ sử dụng D_a tức là z_1 có kích thước $D_{a_1} \times 1$.

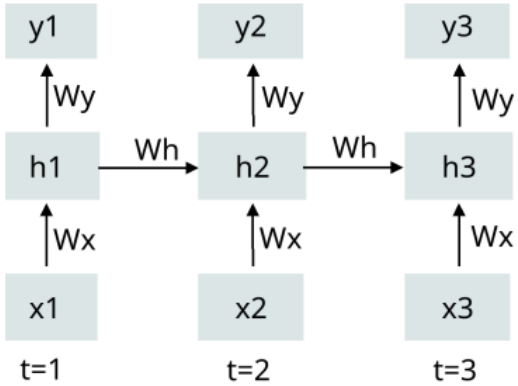
a) Kích thước của W_1, b_1, W_2, b_2 là gì?

b) Tính $\frac{\partial J}{\partial \hat{y}^{(i)}}$, ký hiệu $\delta_1^{(i)}$. Sử dụng kết quả tính $\frac{\partial J}{\partial \hat{y}}$ và $\frac{\partial \hat{y}^{(i)}}{\partial z_2}$

Đề bài 3

Cho mô hình RNN như sau, trong đó cả lớp ẩn và lớp đầu ra đều tuyến tính:

$$h_t = W_x x_t + W_h h_{t-1}$$
$$y(t) = W_y h_t$$



a) Tính giá trị cho các đơn vị ẩn $h_1,\ h_2,\ h_3$ và các đơn vị đầu ra $y_1,\ y_2,\ y_3$, với các giá trị đầu vào $x_1 = 2,\ x_2 = -0.5,\ x_3 = 1$, giả sử các ma trận trọng số là $W_x = W_h = W_y = 1$.

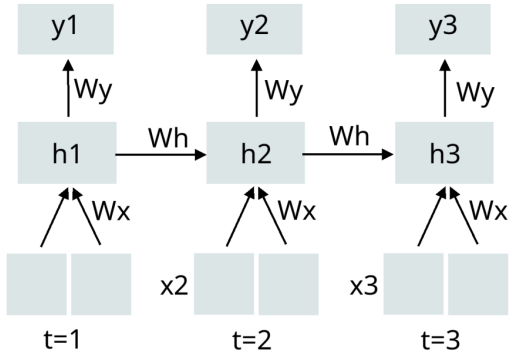
b) Đưa ra dạng tổng quát của mạng. .

Đề bài 4

Cho mô hình RNN như sau, trong đó cả lớp ẩn và lớp đầu ra đều tuyến tính:

$$h_t = W_x x_t + W_h h_{t-1}$$

$$y(t) = \sigma(W_y h_t) \text{ với } \sigma(x) = \frac{1}{1+e^{-}}$$



a) Tính giá trị cho các đơn vị ẩn h_1, h_2, h_3 và các đơn vị đầu ra y_1, y_2, y_3, với các giá trị đầu vào $x_1 = (2, -2)$, $x_2 = (0, 3.5)$, $x_3 = (1, 2.2)$, assuming that the weight matrices are $W_x = (1, -1)$, $W_h = W_y = 1$.

b) Đưa ra dạng tổng quát của mạng. .

Good luck!