卷积神经网络(CNN)反向传播算法推导

主要参考了Convolutional Neural Networks backpropagation: from intuition to derivation – Grzegorz Gwardys (wordpress.com)

卷积神经网络(CNN)反向传播算法主要分为两部分: 池化层反向传播和卷积层反向传播。

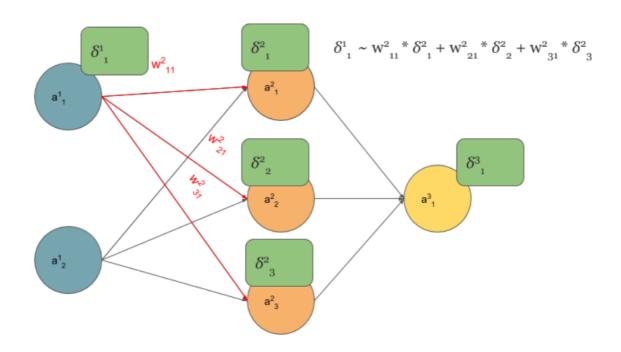
大致的思路:

池化层反向传播

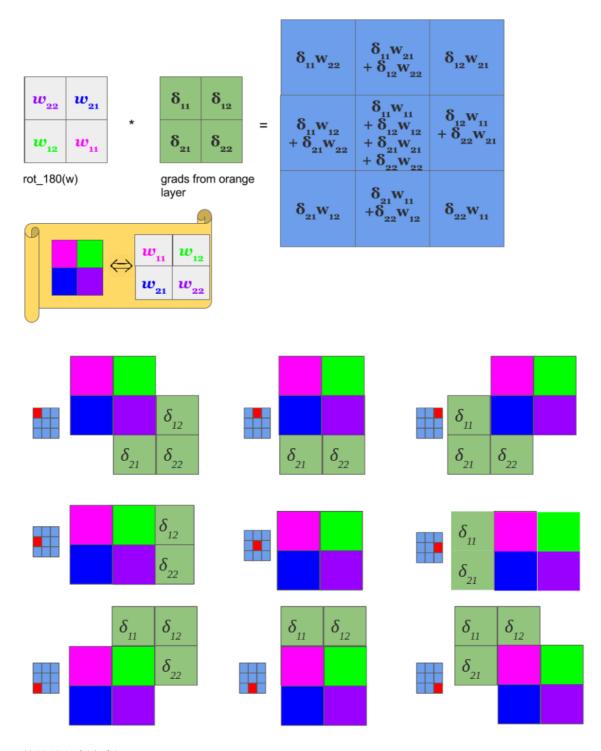
池化层的反向传播比较容易理解,我们以**最大池化**举例,上图中,池化后的数字6对应于池化前的红色区域,实际上只有红色区域中最大值数字6对池化后的结果有影响,权重为1,而其它的数字对池化后的结果影响都为0。假设池化后数字6的位置误差为 δ ,误差反向传播回去时,红色区域中最大值对应的位置误差即等于 δ ,而其它3个位置对应的 δ 误差为0。因此,在卷积神经网络最大池化前向传播时,不仅要记录区域的最大值,同时也要记录下来区域最大值的位置,方便 δ 误差的反向传播。而**平均池化**就更简单了,由于平均池化时,区域中每个值对池化后结果贡献的权重都为区域大小的倒数,所以 δ 误差反向传播回来时,在区域每个位置的误差都为池化后 δ 误差除以区域的大小。

卷积层反向传播

核心的计算只涉及二维卷积,因此我们先从二维的卷积运算来进行分析:求原图某处的δ,需分析它在前向传播中影响了下一层的哪些结点,大致为以下过程



我们可以发现这样一个规律,原图的 δ 误差,等于卷积结果的 δ 误差**经过零填充**后,与**卷积核旋转180度**后的卷积。如下图所示:



具体的数学表达式如下

$$\boldsymbol{\delta}_{j}^{l} = \boldsymbol{f}^{'}(\boldsymbol{u}_{j}^{l}) \odot \operatorname{conv2}(\boldsymbol{\delta}_{j}^{l+1}, \operatorname{rot180}(k_{j}^{l+1}),' \operatorname{full}')$$

接下来进行数学公式的推导:

考虑 δ 误差是损失函数对于当前层未激活输出 z^l 的导数,我们现在考虑的是二维卷积,因此,每一层的 δ 误差是一个二维的矩阵。 $\delta^l(x,y)$ 表示的是第|层坐标为(x,y)处的 δ 误差。假设我们已经知道第l+1层的 δ 误差,利用求导的链式法则,可以很容易写出下式:

$$\delta^{l}(x,y) = \frac{\partial C}{\partial z^{l}(x,y)} = \sum_{x^{'}} \sum_{y^{'}} \frac{\partial C}{\partial z^{l+1}(x^{'},y^{'})} \frac{\partial z^{l+1}(x^{'},y^{'})}{\partial z^{l}(x,y)} = \sum_{x^{'}} \sum_{y^{'}} \delta^{l+1}(x^{'},y^{'}) \frac{\partial z^{l+1}(x^{'},y^{'})}{\partial z^{l}(x,y)}$$

其中,坐标 $(x^{'},y^{'})$ 是第l+1层在前向传播中受第l层坐标(x,y)影响的点,我们需要将所有受影响的点都加起来,再用到前向传播的关系式:

$$z^{l+1}(x^{'},y^{'}) = \sum_{a} \sum_{b} \sigma(z^{l}(x^{'}+a,y^{'}+b)) w^{l+1}(a,b) + b^{l+1}$$

那么我们可以将表达式展开:

$$\delta^{l}(x,y) = \sum_{x^{'}} \sum_{y^{'}} \delta^{l+1}(x^{'},y^{'}) rac{\partial \sum_{a} \sum_{b} \sigma(z^{l}(x^{'}+a,y^{'}+b)) w^{l+1}(a,b) + b^{l+1})}{\partial z^{l}(x,y)}$$

同时我们可以对他进行化简:

$$\delta^{l}(x,y) = \sum_{x^{'}} \sum_{y^{'}} \delta^{l+1}(x^{'},y^{'}) w^{l+1}(a,b) \sigma^{'}(z^{l}(x,y))$$

同时因为限制条件 $x^{'}+a=x$ 和 $y^{'}+b=y$

那么上式可变为

$$\delta^l(x,y) = \sum_a \sum_b \delta^{l+1}(x-a,y-b) w^{l+1}(a,b) \sigma^{'}(z^l(x,y))$$

令a'=-a以及b'=-b那么我们有

$$\delta^{l}(x,y) = \sum_{a^{'}} \sum_{b^{'}} \delta^{l+1}(x+a^{'},y+b^{'}) w^{l+1}(-a^{'},-b^{'}) \sigma^{'}(z^{l}(x,y))$$

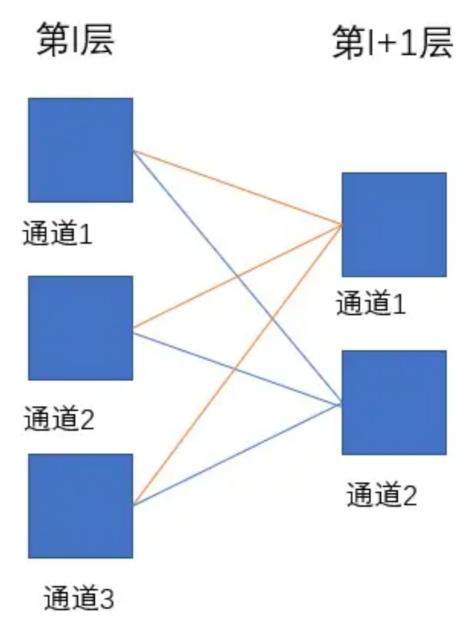
即

$$\delta^l = \operatorname{conv2}(\delta^{l+1}, \operatorname{rot}180(w^{l+1})) \odot \sigma^{'}(z^l)$$

这个表达式只是基于二维卷积,我们需要把它推广到卷积神经网络中张量的卷积里去。

张量的卷积:后一层的每个通道都是由前一层的各个通道经过卷积再求和得到的

类比全连接神经网络:把通道变成结点,把卷积变成乘上权重。



上图中每根连线都代表与一个二维卷积核的卷积操作,假设第I层深度为3,第I+1层深度为2,卷积核的维度就应该为2×filter_size×filter_size×3。第I层的通道1通过卷积影响了第I+1层的通道1和通道2,那么求第I层通道1的误差时,就应该根据求得的二维卷积的误差传播方式,将第I+1层通道1和通道2的 δ 误差传播到第I层的 δ 误差进行简单**求和**即可。

接下来我们分析一些情况

已知第I层delta误差,求该层的参数的导数 $\frac{\partial C}{\partial w^l}$

$$\delta^l = rac{\partial C}{\partial z^l}, z^l = a^{l+1} * w^l + b^l$$

第I层卷积核 w^l 是一个4维张量,它的维度表示为卷积核个数×行数×列数×通道数。实际上,可以把它视为有卷积核个数×通道数个二维卷积核,每个都对应输入图像的对应通道和输出图像的对应通道,每一个二维卷积核只涉及到一次二维卷积运算。那求得整个卷积核的导数,只需分析卷积核数×通道数次二维卷积中每个二维卷积核的导数,再将其组合成4维张量即可。

而二维卷积核的导数等于原图对应通道与卷积结果对应通道的 δ 误差直接进行卷积。

那么

$$\frac{\partial C}{\partial w^l} = \frac{\partial C}{\partial z^l} \frac{\partial z^l}{\partial w^l} = \delta^l * a^{l-1}$$

然后我们将**原图通道数×卷积结果通道数**个二维卷积核的导数重新进行组合成4为张量,即可得到整个卷积核的导数。

$$egin{aligned} rac{\partial C}{\partial w^l(a,b)} &= \sum_x \sum_y \delta^l(x,y) rac{\partial z^l(x,y)}{\partial w^l(a,b)} \ rac{\partial C}{\partial w^l(a,b)} &= \sum_x \sum_y \delta^l(x,y) rac{\partial \sum_{a^{'}} \sum_{b^{'}} \sigma(z^{l-1}(x+a^{'},y+b^{'})) w^l(a^{'},b^{'}) + b^l)}{\partial w^l(a,b)} \end{aligned}$$

化简得到限制条件: $a^{'}=a,b^{'}=b$:

$$egin{aligned} rac{\partial C}{\partial w^l(a,b)} &= \sum_x \sum_y \delta^l(x,y) \sigma(z^{l-1}(x+a,y+b)) \sigma^{'}(z^{l-1}(x+b,y+b)) \ &rac{\partial C}{\partial w^l} &= \delta^l * \sigma(z^{l-1}) \end{aligned}$$

这边我们发现并不需要进行旋转180度

已知第I层delta误差,求该层的参数的导数 $rac{\partial C}{\partial b^l}$

 b^l 是一个列向量,它给卷积结果的每一个通道都加上了同一个标量。在反向传播时,它的导数等于卷积结果的delta误差在每一个通道上将所有delta误差进行求和的结果。

即

$$rac{\partial C}{\partial b^l} = rac{\partial C}{\partial z^l} rac{\partial z^l}{\partial b^l} = \sum_x \sum_y \delta^l$$

证明也非常方便由于 $rac{\partial z^l(x,y)}{\partial b^l}=1$