



矩阵求导——MLP神经网络



覃雄派



提纲

- 矩阵求导——MLP神经网络



矩阵求导——MLP神经网络

矩阵求导

X
10元素
 $A^{[0]}$

$W^{[1]}, b^{[1]}$

隐藏层
64神经元
 $Z^{[1]} \rightarrow A^{[1]}$

$W^{[2]}, b^{[2]}$

输出层
1个神经元
 $Z^{[2]} \rightarrow A^{[2]}$

损失函数J
二元交叉熵

神经网络

– 处理过程 $A^{[0]} \rightarrow Z^{[1]} \rightarrow A^{[1]} \rightarrow Z^{[2]} \rightarrow A^{[2]}$

– X即 $A^{[0]}$

有7个样本，每个样本为 10×1 的列向量，7个样本就是 10×7

– (1) $Z^{[1]} = W^{[1]}X + b^{[1]} = (64 \times 10)(10 \times 7) + (64 \times 1) = (64 \times 7)$

– (2) $A^{[1]} = \sigma(Z^{[1]}) = (64 \times 7)$

– (3) $Z^{[2]} = W^{[2]}A^{[1]} + b^{[2]} = (1 \times 64)(64 \times 7) + (1 \times 1) = (1 \times 7)$

– (4) $\hat{y} = A^{[2]} = \sigma(Z^{[2]}) = (1 \times 7)$

每列加 64×1

每列加 1×1

从输入层计算隐藏层

矩阵求导

X
10元素
 $A^{[0]}$

$W^{[1]}, b^{[1]}$

隐藏层
64神经元
 $Z^{[1]} \rightarrow A^{[1]}$

$W^{[2]}, b^{[2]}$

输出层
1个神经元
 $Z^{[2]} \rightarrow A^{[2]}$

损失函数J
二元交叉熵

神经网络

– 处理过程 $A^{[0]} \rightarrow Z^{[1]} \rightarrow A^{[1]} \rightarrow Z^{[2]} \rightarrow A^{[2]}$

– X即 $A^{[0]}$

– (1) $Z^{[1]} = W^{[1]}X + b^{[1]} = (64*10)(10*7) + (64*1) = (64*7)$

– (2) $A^{[1]} = \sigma(Z^{[1]}) = (64*7)$ σ 针对每个元素操作

– (3) $Z^{[2]} = W^{[2]}A^{[1]} + b^{[2]} = (1*64)(64*7) + (1*1) = (1*7)$

– (4) $\hat{y} = A^{[2]} = \sigma(Z^{[2]}) = (1*7)$

有7个样本，每个样本为 10×1 的列向量，7个样本就是 $10*7$

每列加 $64*1$

每列加 $1*1$

隐藏层的非线性传导

矩阵求导

X
10元素
 $A^{[0]}$

$W^{[1]}, b^{[1]}$

隐藏层
64神经元
 $Z^{[1]} \rightarrow A^{[1]}$

$W^{[2]}, b^{[2]}$

输出层
1个神经元
 $Z^{[2]} \rightarrow A^{[2]}$

损失函数J
二元交叉熵

神经网络

– 处理过程 $A^{[0]} \rightarrow Z^{[1]} \rightarrow A^{[1]} \rightarrow Z^{[2]} \rightarrow A^{[2]}$

– X即 $A^{[0]}$

– (1) $Z^{[1]} = W^{[1]}X + b^{[1]} = (64*10)(10*7) + (64*1) = (64*7)$

– (2) $A^{[1]} = \sigma(Z^{[1]}) = (64*7)$

– (3) $Z^{[2]} = W^{[2]}A^{[1]} + b^{[2]} = (1*64)(64*7) + (1*1) = (1*7)$

– (4) $\hat{y} = A^{[2]} = \sigma(Z^{[2]}) = (1*7)$

有7个样本，每个样本为 10×1 的列向量，7个样本就是 $10*7$

每列加 $64*1$

每列加 $1*1$

从隐藏层计算输出层

矩阵求导

X
10元素
 $A^{[0]}$

$W^{[1]}, b^{[1]}$

隐藏层
64神经元
 $Z^{[1]} \rightarrow A^{[1]}$

$W^{[2]}, b^{[2]}$

输出层
1个神经元
 $Z^{[2]} \rightarrow A^{[2]}$

损失函数J
二元交叉熵

神经网络

– 处理过程 $A^{[0]} \rightarrow Z^{[1]} \rightarrow A^{[1]} \rightarrow Z^{[2]} \rightarrow A^{[2]}$

– X即 $A^{[0]}$

– (1) $Z^{[1]} = W^{[1]}X + b^{[1]} = (64*10)(10*7) + (64*1) = (64*7)$

– (2) $A^{[1]} = \sigma(Z^{[1]}) = (64*7)$

– (3) $Z^{[2]} = W^{[2]}A^{[1]} + b^{[2]} = (1*64)(64*7) + (1*1) = (1*7)$

– (4) $\hat{y} = A^{[2]} = \sigma(Z^{[2]}) = (1*7)$

有7个样本，每个样本为 10×1 的列向量，7个样本就是 $10*7$

每列加 $64*1$

每列加 $1*1$

输出层的非线性传导

矩阵求导

X
10元素
 $A^{[0]}$

$W^{[1]}, b^{[1]}$

隐藏层
64神经元
 $Z^{[1]} \rightarrow A^{[1]}$

$W^{[2]}, b^{[2]}$

输出层
1个神经元
 $Z^{[2]} \rightarrow A^{[2]}$

损失函数J
二元交叉熵

神经网络

– X即 $A^{[0]}$

– 处理过程 $A^{[0]} \rightarrow Z^{[1]} \rightarrow A^{[1]} \rightarrow Z^{[2]} \rightarrow A^{[2]}$

有7个样本，每个样本为 10×1 的列向量，7个样本就是 10×7

– 最后用 $A^{[2]}$ 构造损失函数，注意 $A^{[2]}$ 即预测值 \hat{y}

• 二值分类器(0/1)的交叉熵损失函数的形式为

$$J = -\frac{1}{n} ((Y \log(A^{[2]}) + (1 - Y) \log(1 - A^{[2]})))$$

$$Y = (1 * 7)$$

$$\hat{y} = A^{[2]} = (1 * 7)$$

$$dA^{[2]} = -\frac{Y}{A^{[2]}} + \frac{1 - Y}{1 - A^{[2]}} = (1 * 7)$$

根据损失函数计算损失值

矩阵求导

X
10元素
 $A^{[0]}$

$W^{[1]}, b^{[1]}$

隐藏层
64神经元
 $Z^{[1]} \rightarrow A^{[1]}$

$W^{[2]}, b^{[2]}$

输出层
1个神经元
 $Z^{[2]} \rightarrow A^{[2]}$

损失函数J
二元交叉熵

神经网络

处理过程 $A^{[0]} \rightarrow Z^{[1]} \rightarrow A^{[1]} \rightarrow Z^{[2]} \rightarrow A^{[2]}$

X即 $A^{[0]}$

(1) $Z^{[1]} = W^{[1]}X + b^{[1]} = (64 \times 10)(10 \times 7) + (64 \times 1) = (64 \times 7)$

(2) $A^{[1]} = \sigma(Z^{[1]}) = (64 \times 7)$

(3) $Z^{[2]} = W^{[2]}A^{[1]} + b^{[2]} = (1 \times 64)(64 \times 7) + (1 \times 1) = (1 \times 7)$

(4) $\hat{y} = A^{[2]} = \sigma(Z^{[2]}) = (1 \times 7)$

最后用 $A^{[2]}$ 构造损失函数, 注意 $A^{[2]}$ 即预测值 \hat{y}

- 二值分类器(0/1)的交叉熵损失函数的形式为

$$J = -\frac{1}{n} (Y \log(A^{[2]}) + (1 - Y) \log(1 - A^{[2]}))$$

计算损失函数对 $W^{[1]}, b^{[1]}, W^{[2]}, b^{[2]}$ 的导数

$$dA^{[2]} = -\frac{Y}{A^{[2]}} + \frac{1 - Y}{1 - A^{[2]}} = (1 \times 7)$$

矩阵的各个位置点乘

$$dZ^{[2]} = dA^{[2]} g'(Z^{[2]}) (1 \times 7) (1 \times 7)$$

$$\begin{aligned} dW^{[2]} &= \frac{dJ}{dW^{[2]}} = \frac{dJ}{dA^{[2]}} \frac{dA^{[2]}}{dZ^{[2]}} \frac{dZ^{[2]}}{dW^{[2]}} = \\ &= \frac{dJ}{dZ^{[2]}} \frac{dZ^{[2]}}{dW^{[2]}} \\ &= dZ^{[2]} (A^{[1]})^T \\ &= (1 \times 7)(7 \times 64) \end{aligned}$$

矩阵乘法

$$\frac{\partial \mathbf{a}^T \mathbf{X} \mathbf{b}}{\partial \mathbf{X}} = \mathbf{a} \mathbf{b}^T$$

$$\frac{\partial \mathbf{a}^T \mathbf{X}^T \mathbf{b}}{\partial \mathbf{X}} = \mathbf{b} \mathbf{a}^T$$

$$\frac{\partial \mathbf{a}^T \mathbf{X} \mathbf{a}}{\partial \mathbf{X}} = \frac{\partial \mathbf{a}^T \mathbf{X}^T \mathbf{a}}{\partial \mathbf{X}} = \mathbf{a} \mathbf{a}^T$$

$$\frac{dZ^{[2]}}{dW^{[2]}} = \frac{d(W^{[2]}A^{[1]} + b^{[2]})}{dW^{[2]}} = \frac{d(EW^{[2]}A^{[1]} + b^{[2]})}{dW^{[2]}} = E^T (A^{[1]})^T$$

E为单位矩阵

矩阵求导

X
10元素
 $A^{[0]}$

$W^{[1]}$ 、 $b^{[1]}$

隐藏层
64神经元
 $Z^{[1]} \rightarrow A^{[1]}$

$W^{[2]}$ 、 $b^{[2]}$

输出层
1个神经元
 $Z^{[2]} \rightarrow A^{[2]}$

损失函数J
二元交叉熵

神经网络

- 处理过程 $A^{[0]} \rightarrow Z^{[1]} \rightarrow A^{[1]} \rightarrow Z^{[2]} \rightarrow A^{[2]}$
- X即 $A^{[0]}$
- (1) $Z^{[1]} = W^{[1]}X + b^{[1]} = (64 \times 10)(10 \times 7) + (64 \times 1) = (64 \times 7)$
- (2) $A^{[1]} = \sigma(Z^{[1]}) = (64 \times 7)$
- (3) $Z^{[2]} = W^{[2]}A^{[1]} + b^{[2]} = (1 \times 64)(64 \times 7) + (1 \times 1) = (1 \times 7)$
- (4) $\hat{y} = A^{[2]} = \sigma(Z^{[2]}) = (1 \times 7)$
- (5)最后用 $A^{[2]}$ 构造损失函数，，注意 $A^{[2]}$ 即预测值 \hat{y}
 - 二值分类器(0/1)的交叉熵损失函数的形式为
 - $J = -\frac{1}{n}((Y \log(A^{[2]}) + (1 - Y) \log(1 - A^{[2]}))$
- 计算损失函数对 $W^{[1]}$ 、 $b^{[1]}$ 、 $W^{[2]}$ 、 $b^{[2]}$ 的导数

$$\begin{aligned} \frac{dJ}{db^{[2]}} &= \frac{dJ}{dA^{[2]}} \frac{dA^{[2]}}{dZ^{[2]}} \frac{dZ^{[2]}}{db^{[2]}} \\ &= [A^{[2]} - Y][1] = [A^{[2]} - Y] \\ &= dZ^{[2]}[1] \\ (1 \times 7)(7 \times 1) &\text{ 相当于每行的各列累加} \end{aligned}$$

为下一步准备

$$\begin{aligned} \frac{dJ}{dA^{[1]}} &= \frac{dJ}{dA^{[2]}} \frac{dA^{[2]}}{dZ^{[2]}} \frac{dZ^{[2]}}{dA^{[1]}} = \frac{dJ}{dZ^{[2]}} \frac{dZ^{[2]}}{dA^{[1]}} \\ &= dZ^{[2]}(W^{[2]})^T \\ (W^{[2]})^T dZ^{[2]} &\text{ 才能完成矩阵相乘} \\ (64 \times 1)(1 \times 7) & \end{aligned}$$

$$\frac{dZ^{[2]}}{dA^{[1]}} = \frac{d(W^{[2]}A^{[1]} + b^{[2]})}{dA^{[1]}} = (W^{[2]})^T$$

矩阵求导

X
10元素
 $A^{[0]}$

$W^{[1]}$, $b^{[1]}$

隐藏层
64神经元
 $Z^{[1]} \rightarrow A^{[1]}$

$W^{[2]}$, $b^{[2]}$

输出层
1个神经元
 $Z^{[2]} \rightarrow A^{[2]}$

损失函数J
二元交叉熵

神经网络

- 处理过程 $A^{[0]} \rightarrow Z^{[1]} \rightarrow A^{[1]} \rightarrow Z^{[2]} \rightarrow A^{[2]}$
- X即 $A^{[0]}$
- (1) $Z^{[1]} = W^{[1]}X + b^{[1]} = (64 \times 10)(10 \times 7) + (64 \times 1) = (64 \times 7)$
- (2) $A^{[1]} = \sigma(Z^{[1]}) = (64 \times 7)$
- (3) $Z^{[2]} = W^{[2]}A^{[1]} + b^{[2]} = (1 \times 64)(64 \times 7) + (1 \times 1) = (1 \times 7)$
- (4) $\hat{y} = A^{[2]} = \sigma(Z^{[2]}) = (1 \times 7)$
- (5) 最后用 $A^{[2]}$ 构造损失函数, , 注意 $A^{[2]}$ 即预测值 \hat{y}
 - 二值分类器(0/1)的交叉熵损失函数的形式为
 - $J = -\frac{1}{n}((Y \log(A^{[2]}) + (1 - Y) \log(1 - A^{[2]})))$
- 计算损失函数对 $W^{[1]}$ 、 $b^{[1]}$ 、 $W^{[2]}$ 、 $b^{[2]}$ 的导数

$$dZ^{[1]} = dA^{[1]} g'(Z^{[1]}) \quad \text{矩阵的各个位置点乘} \\ (64 \times 7) (64 \times 7)$$

$$dW^{[1]} = \frac{dJ}{dW^{[1]}} = \frac{dJ}{dA^{[2]}} \frac{dA^{[2]}}{dZ^{[2]}} \frac{dZ^{[2]}}{dA^{[1]}} \frac{dA^{[1]}}{dZ^{[1]}} \frac{dZ^{[1]}}{dW^{[1]}} = \\ \frac{dJ}{dZ^{[1]}} \frac{dZ^{[1]}}{dW^{[1]}} \\ = dZ^{[1]} (A^{[0]})^T \quad \text{矩阵乘法} \\ (64 \times 7)(7 \times 10)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial a^T X b}{\partial X} &= ab^T \\ \frac{\partial a^T X^T b}{\partial X} &= ba^T \\ \frac{\partial a^T X a}{\partial X} &= \frac{\partial a^T X^T a}{\partial X} = aa^T \end{aligned}$$

$$\frac{dZ^{[1]}}{dW^{[1]}} = \frac{d(W^{[1]}A^{[0]} + b^{[1]})}{dW^{[1]}} = \frac{d(EW^{[1]}A^{[0]} + b^{[1]})}{dW^{[1]}} = E^T (A^{[0]})^T$$

E为单位矩阵

矩阵求导

X
10元素
 $A^{[0]}$

$W^{[1]}$ 、 $b^{[1]}$

隐藏层
64神经元
 $Z^{[1]} \rightarrow A^{[1]}$

$W^{[2]}$ 、 $b^{[2]}$

输出层
1个神经元
 $Z^{[2]} \rightarrow A^{[2]}$

损失函数J
二元交叉熵

神经网络

- 处理过程 $A^{[0]} \rightarrow Z^{[1]} \rightarrow A^{[1]} \rightarrow Z^{[2]} \rightarrow A^{[2]}$
- X即 $A^{[0]}$
- (1) $Z^{[1]} = W^{[1]}X + b^{[1]} = (64 \times 10)(10 \times 7) + (64 \times 1) = (64 \times 7)$
- (2) $A^{[1]} = \sigma(Z^{[1]}) = (64 \times 7)$
- (3) $Z^{[2]} = W^{[2]}A^{[1]} + b^{[2]} = (1 \times 64)(64 \times 7) + (1 \times 1) = (1 \times 7)$
- (4) $\hat{y} = A^{[2]} = \sigma(Z^{[2]}) = (1 \times 7)$
- (5) 最后用 $A^{[2]}$ 构造损失函数，，注意 $A^{[2]}$ 即预测值 \hat{y}
 - 二值分类器(0/1)的交叉熵损失函数的形式为
 - $J = -\frac{1}{n}((Y \log(A^{[2]}) + (1 - Y) \log(1 - A^{[2]})))$
- 计算损失函数对 $W^{[1]}$ 、 $b^{[1]}$ 、 $W^{[2]}$ 、 $b^{[2]}$ 的导数

$$\begin{aligned} db^{[1]} &= \frac{dJ}{db^{[1]}} = \frac{dJ}{dA^{[2]}} \frac{dA^{[2]}}{dZ^{[2]}} \frac{dZ^{[2]}}{dA^{[1]}} \frac{dA^{[1]}}{dZ^{[1]}} \frac{dZ^{[1]}}{db^{[1]}} = \\ &= \frac{dJ}{dZ^{[1]}} \frac{dZ^{[1]}}{db^{[1]}} = \\ &= \frac{dZ^{[1]}}{db^{[1]}}[1] = \\ &= (64 \times 7)(7 \times 1) \end{aligned}$$

相当于每行的各列累加

矩阵求导

