2020-2021学年秋季学期

自然语言处理
Natural Language Processing

授课教师：　胡玥

助　　教：　　于静

自然语言处理

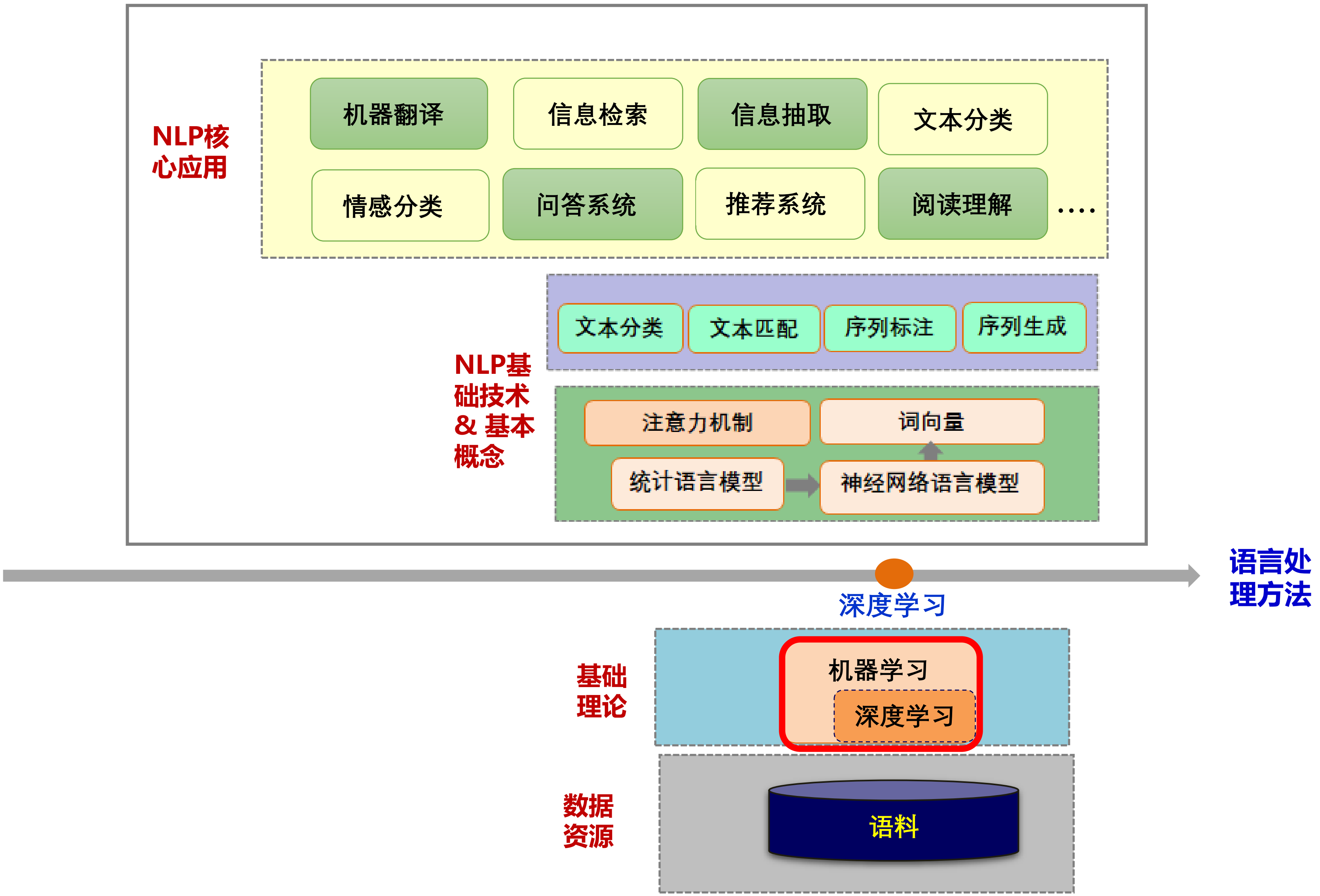
Natural Language Processing

第 4 章　人工神经网络

授课教师：　胡玥

授课时间：2020.9

基于深度学习的自然语言处理课程内容



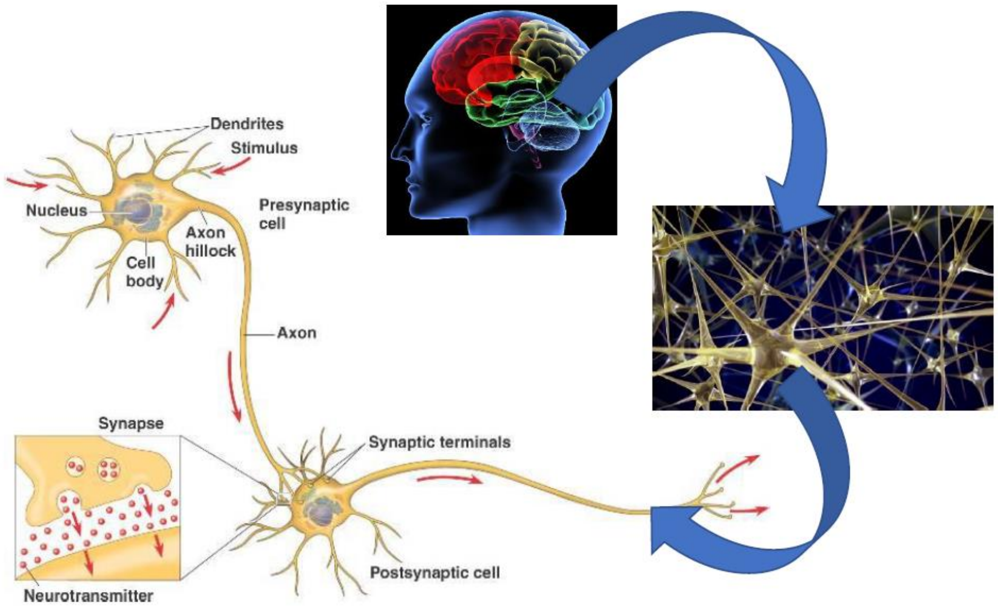
概 要

本章主要内容：本章主要介绍人工神经网络的基本概念，模型结构，参数学习算法及参数学习过程中存在问题。其中，模型结构包括：神经元模型，全连结前馈神经网络DNN；学习算法包括：梯度下降算法，BP反向传播算法

本章教学目的：通过本章教学使学生了解人工神经网络的基本概念，掌握基本的神经网络DNN的模型结构及其训练方法。

引言

Inspired from Human Brains



大脑可视作为1000多亿神经元组成的神经网络

人脑特点：巨量并行性；信息处理和存储单元结合在一起；自组织自学习功能

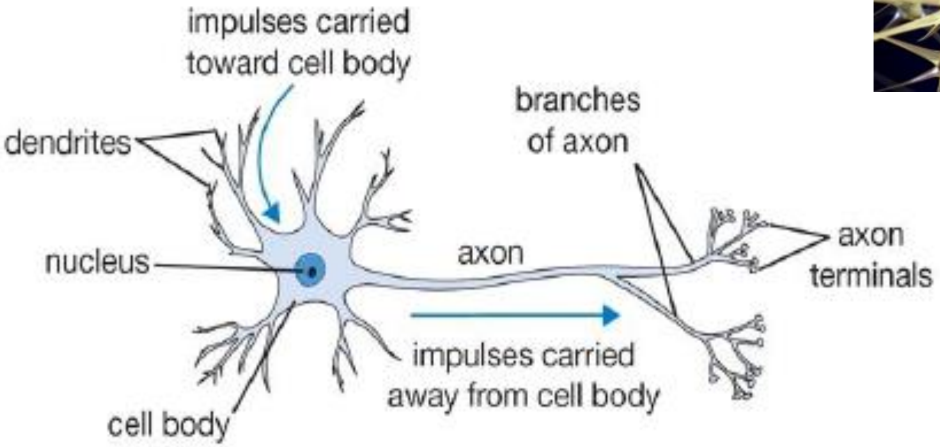
本章内容结构

	模型结构	模型训练/学习
前馈神经网络DNN	前馈神经网络DNN	反向传播算法BP 梯度消失/溢出问题
基础	人工神经元模型	梯度下降法

内 容 提 要

4.1 神经元模型

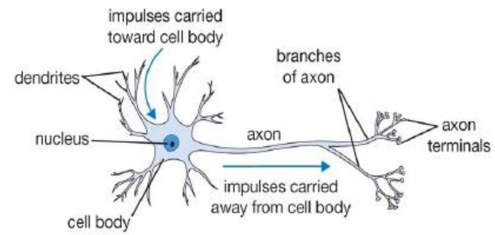
1.生物神经元

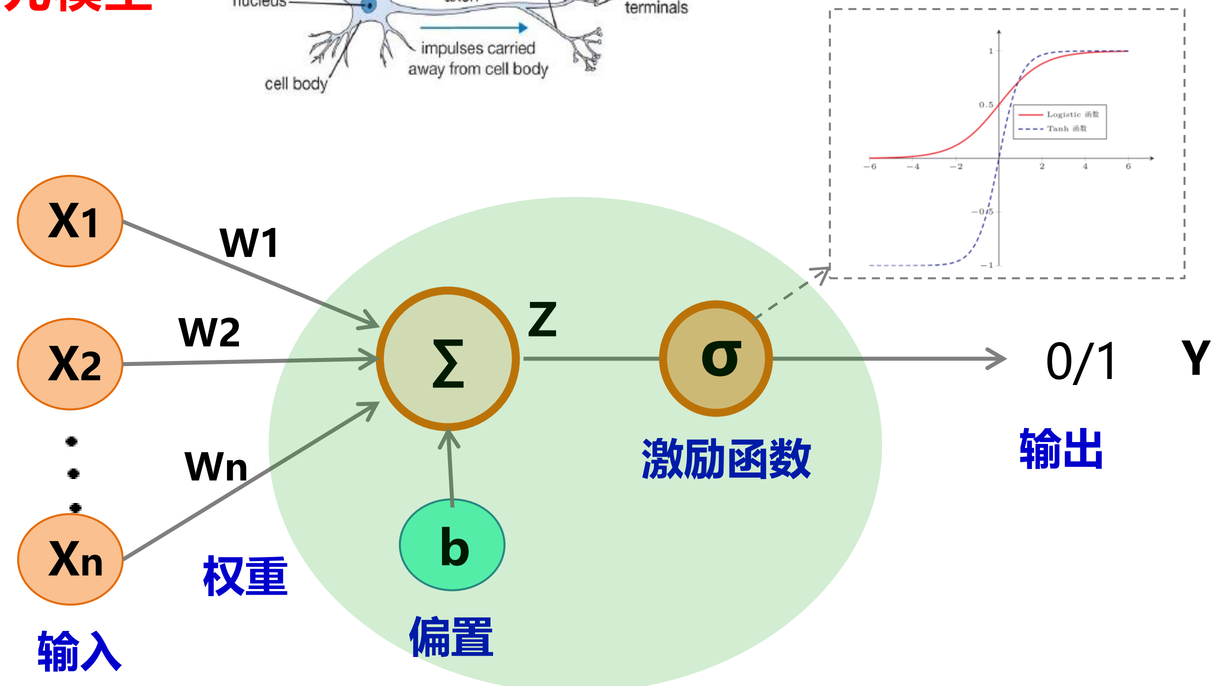


单个神经细胞只有两种状态：兴奋和抑制

4.1 神经元模型

2.人工神经元模型





输入： X

输出： Y

参数： w，b

函数关系：

$$Z = X_1W_1 + X_2W_2 + \ldots + X_nW_n + b$$

$$Y = \sigma(Z) = \sigma(W^TX + b)$$

3. 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

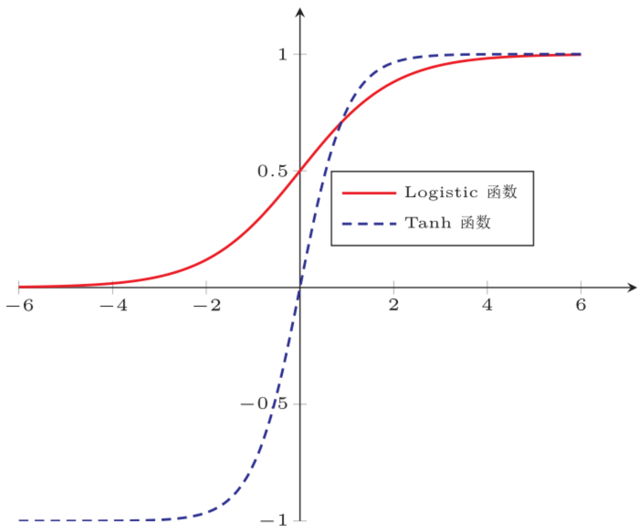
- 连续并可导（允许少数点上不可导）的非线性函数。
  - 可导的激活函数可以直接利用数值优化的方法来学习网络参数。
- 激活函数及其导函数要尽可能的简单
  - 有利于提高网络计算效率。
- 激活函数的导函数的值域要在一个合适的区间内
  - 不能太大也不能太小，否则会影响训练的效率和稳定性。

4.1 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。

4.1 神经元模型

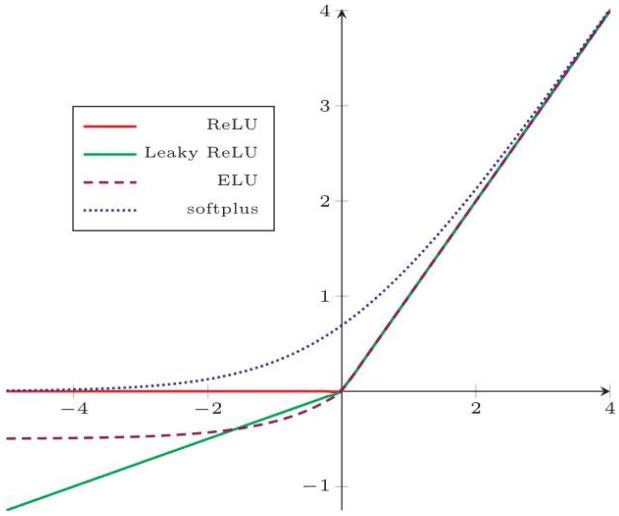
常用激活函数

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

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

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

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



- 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

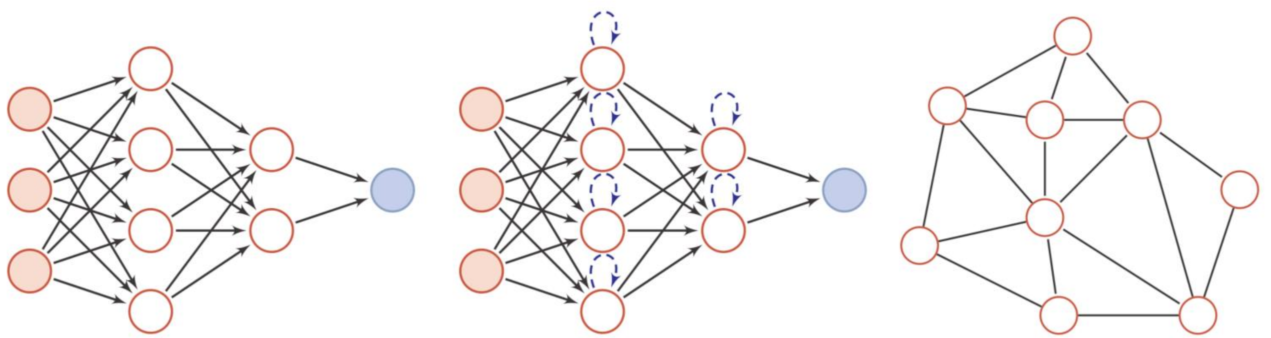
4.1 神经元模型

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	$f(x) = \max(0, x) + \min\big(0, \gamma(\exp(x) - 1)\big)$	$f'(x) = I(x > 0) + I(x \le 0) \cdot \gamma \exp(x)$
SoftPlus 函数	$f(x) = \log\big(1 + \exp(x)\big)$	$f'(x) = \frac{1}{1+\exp(-x)}$

4. 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

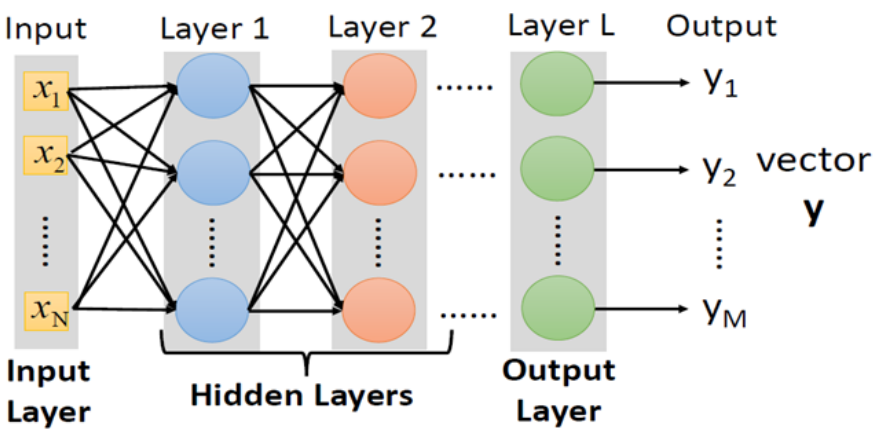


(a) 前馈网络　　(b) 反馈网络　　(c) 图网络

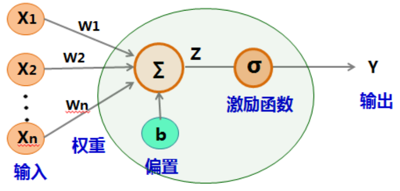
内 容 提 要

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 。

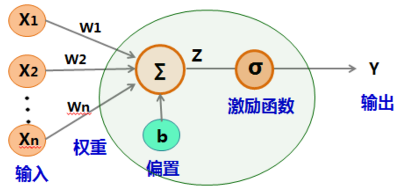


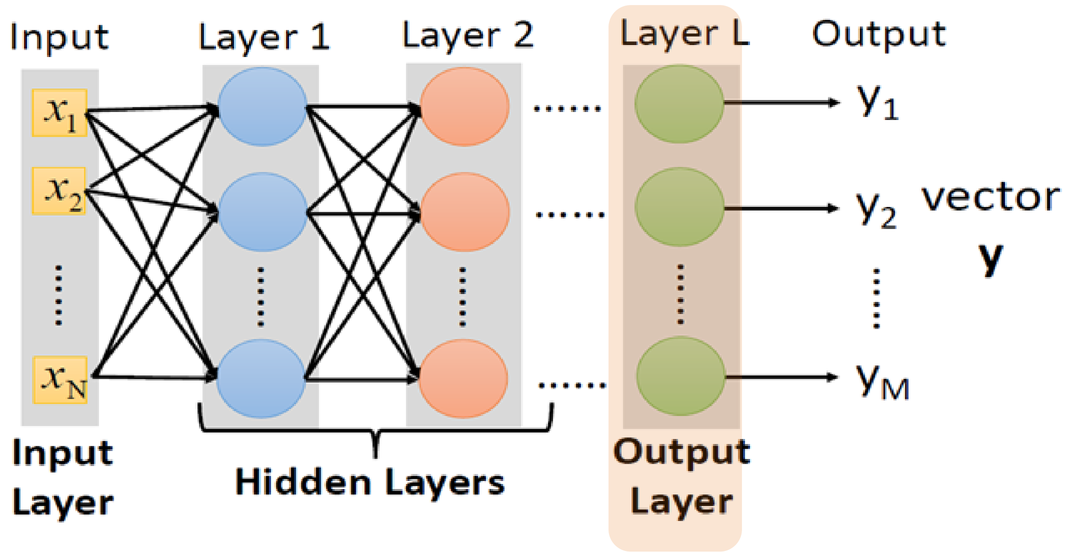
$$f: R^N \to R^M$$



4.2 前馈神经网络

DNN模型结构





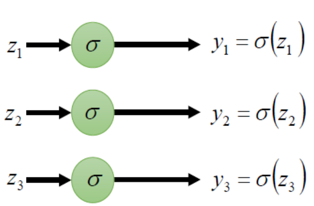
模型输入： **X**

模型输出： **Y**

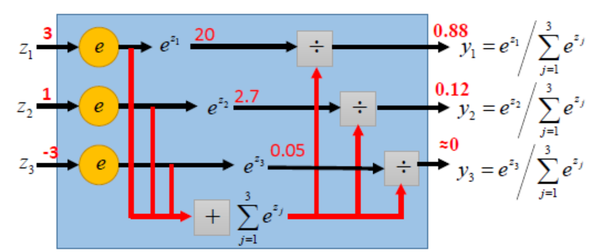
模型参数：

输出层：

一般情况：

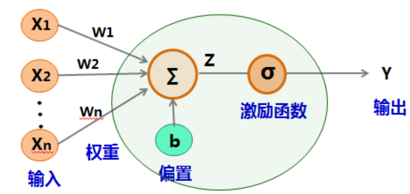


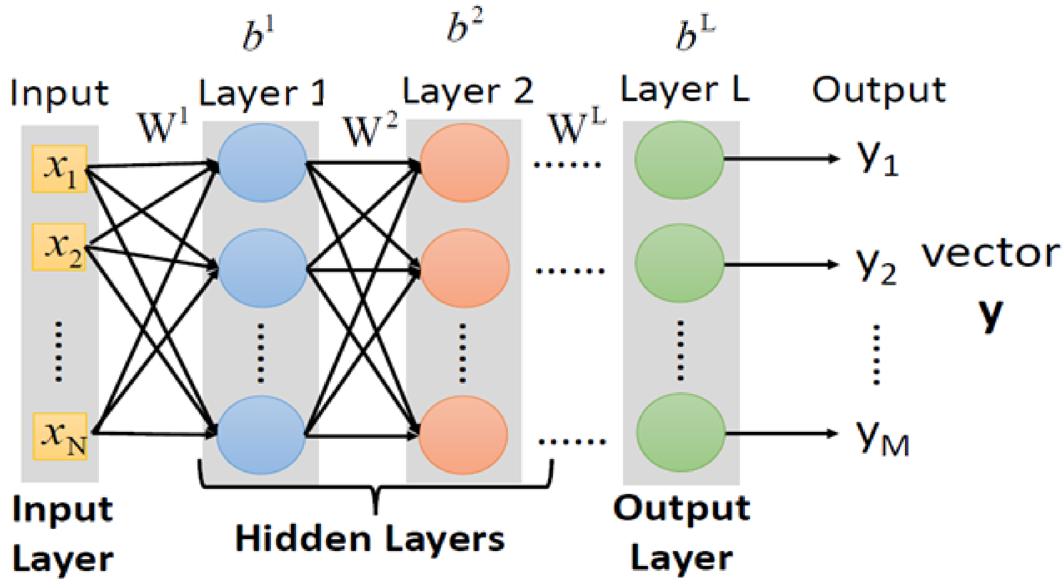
用Softmax 做输出层：



4.2 前馈神经网络

DNN模型结构





模型输入： $\mathbf{X}$

模型输出： $\mathbf{Y}$

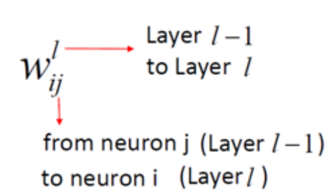
模型参数： 层间连线权重 $W^1, W^2, \ldots W^L$

各层偏置 b^1， $b^2 \ldots b^L$

参数表示说明

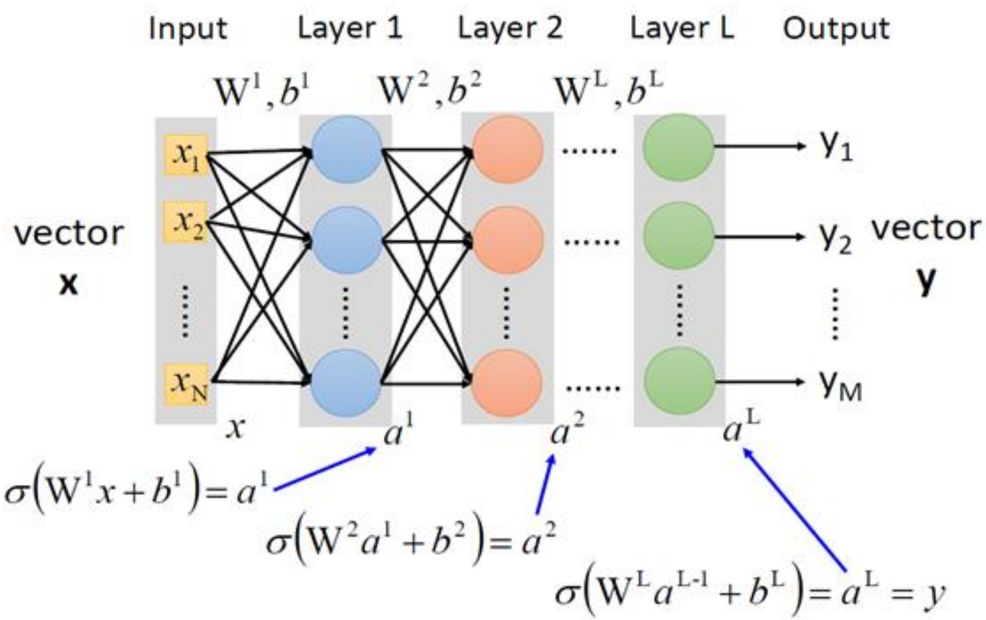
W^l : a weight matrix L-1层 到L层 权重

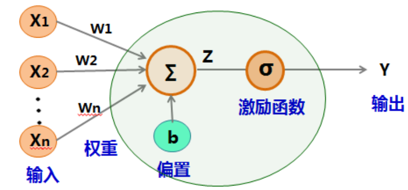
w_{ij}^l : a weight



4.2 前馈神经网络

DNN模型结构





输入、输出参数之间函数关系（信息传播方式）

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

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

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

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

内 容 提 要

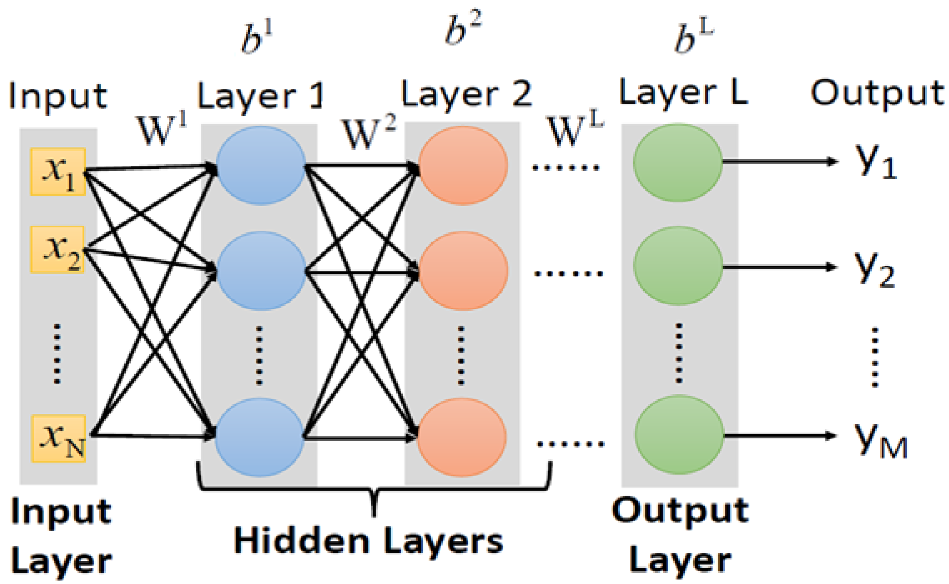
4.4 反向传播算法

问题引入：

知识以参数的形式记忆在模型中　　**如何学习参数（确定模型的参数）？**

前馈神经网络： **有监督训练**　　**给定实例 $(x^i, \hat{y}^i)$**　　**如何求 θ？**

输入： x^i



模型输出： y^i

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

$$\theta = \{ W^1, b^1, W^2, b^2 \ldots W^L, b^L \}$$

4.3 梯度下降法

方法1： 通过列方程解决

但当参数达数百万时，或实例少于参数 时 方程法不可行

方法2： 通过迭代调参方式解决

通过调整参数，让模型输出递归性地逼近标准输出。

神经网络中一般用 方法2 进行参数学习

问题： 怎么调？调到什么程度?

迭代调参方式:

- **定义目标函数（损失函数）：一般将问题转化为求极值问题**
- **优化目标函数：用调参的方式通过求目标函数的极值 来确定参数**

4.3 梯度下降法

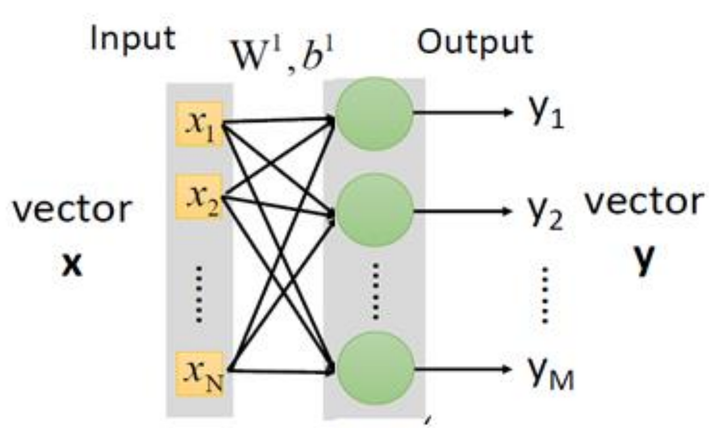
■ **定义目标函数（损失函数）**　**将问题转化为求极值问题**

有监督训练

给定实例 $(x^i, \hat{y}^i)$

$$Y = \sigma(W^1X + b^1) \quad \theta = \{W^1, b^1\}$$

输入：x^i



标准输出：$\hat{y}^i$

逼近

模型输出：$y^i = f(x^i, \theta)$

- **用 y^i 与 $\hat{y}^i$ 的误差定义**

  损失函数：$L(\theta)$ 或 $C(\theta)$

- **问题：求 $\min C(\theta)$**

4.3 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

……

4.3 梯度下降法

绝对值损失函数：

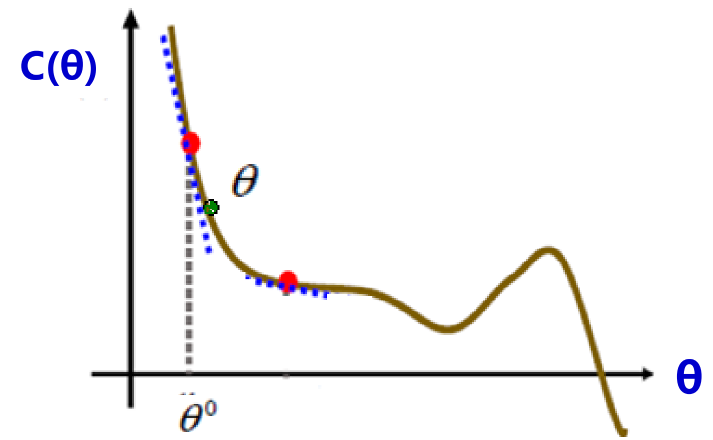
$$L(Y, f(X, \theta)) = |Y - f(X, \theta)|$$

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

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

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 。

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

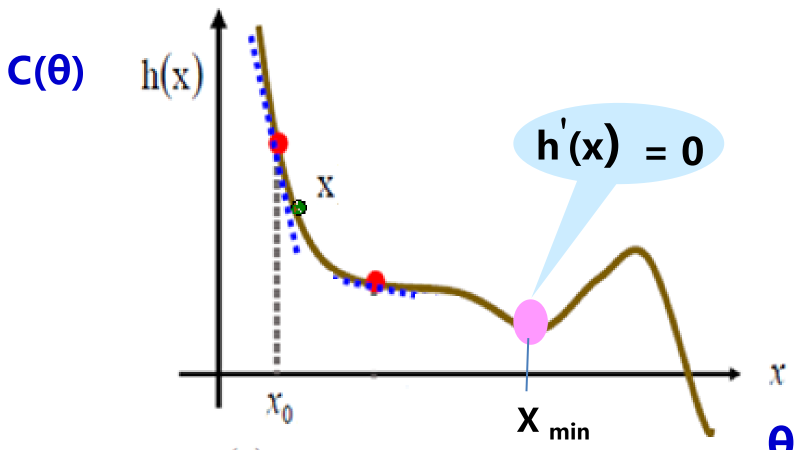
交叉熵损失函数也是负对数似然损失函数

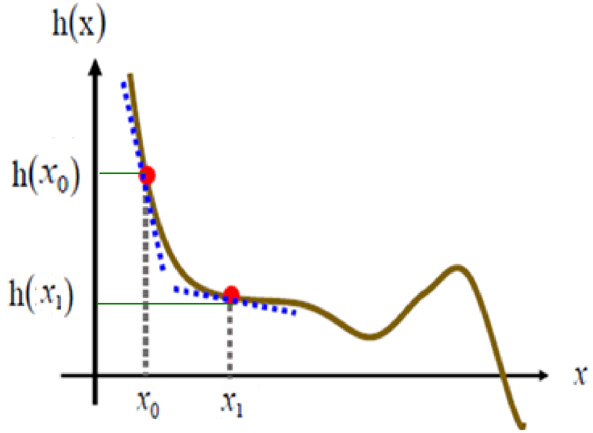
其中:$f_y(\mathbf{x}, \theta)$ 为真实类别y 的似然函数。

4.3 梯度下降法

■ **优化目标函数**　　**迭代调参方式求函数极值**

◆ **问题：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

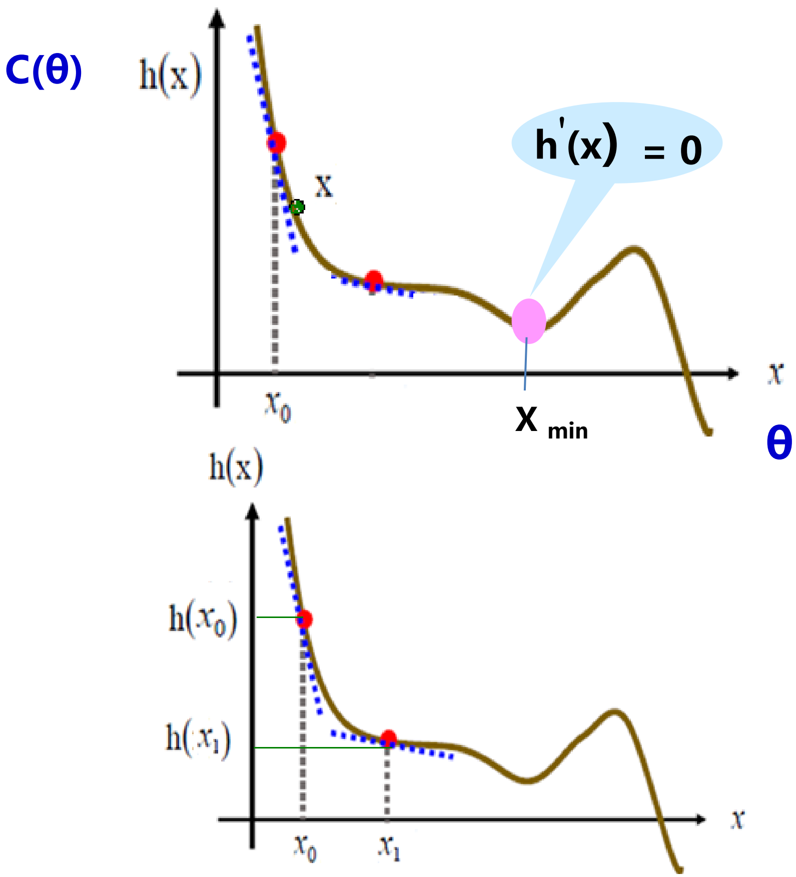
$$h(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{h^{(k)}(x_0)}{k!}(x-x_0)^k$$

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

当 x 与 x_0 足够接近时

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

4.3 梯度下降法



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

$$h(x_1) = h(x_0) + h'(x_0)(x_1 - x_0)$$

目标：求 h(X) 极小值

每次取X_{i+1}应满足 $h(X_{i+1}) < h(X_i)$

$$h(x_1) - h(x_0) = h'(x_0)(x_1 - x_0) < 0$$

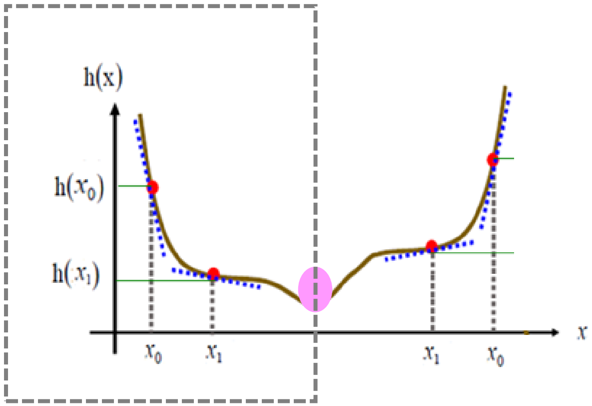
$$\boxed{h'(x_0)(x_1 - x_0) < 0}$$

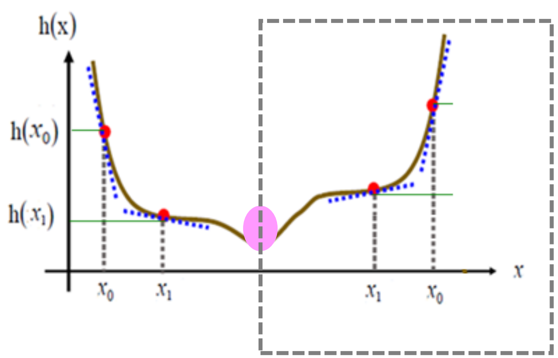
每步参数调整

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

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

4.3 梯度下降法





验证

从左向右调整：

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

$$\boxed{h'(x_0)(x_1 - x_0) \; < 0}$$

从右向左调整：

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

$$\boxed{h'(x_0)(x_1 - x_0) \; < 0}$$

参数调整方法 – 梯度下降：

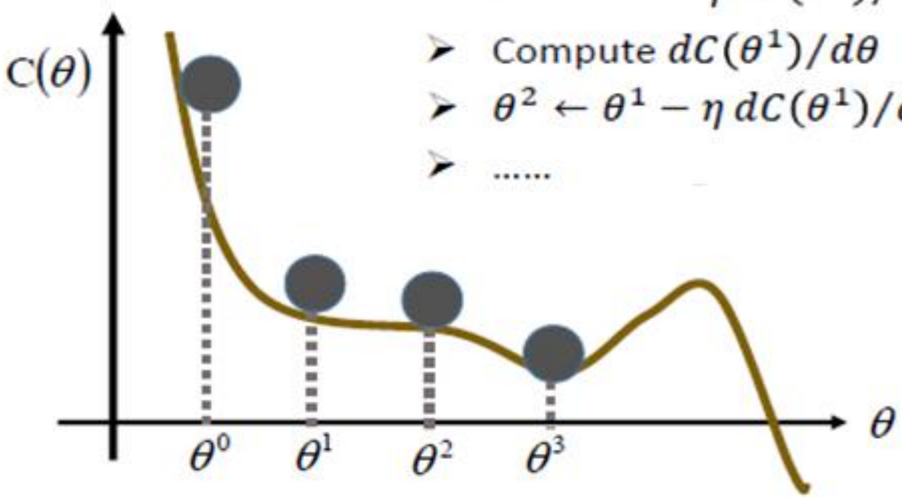
$$\boxed{X_{i+1} \leftarrow X_i - \eta\, h'(x_i)}$$ 直到 $h'(x_i)=0$

学习率　　梯度

4.3 梯度下降法

梯度下降过程：

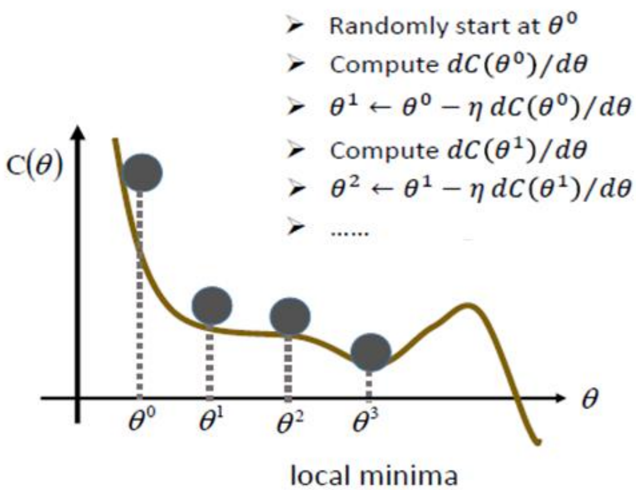
- Randomly start at θ^0
- Compute $dC(\theta^0)/d\theta$
- $\theta^1 \leftarrow \theta^0 - \eta\, dC(\theta^0)/d\theta$
- Compute $dC(\theta^1)/d\theta$
- $\theta^2 \leftarrow \theta^1 - \eta\, dC(\theta^1)/d\theta$
- ……



local minima

4.3 梯度下降法

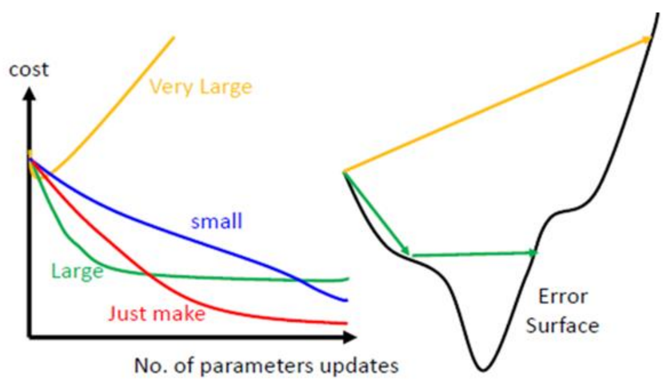
梯度下降中问题：



（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

梯度下降法学习参数

给定训练数据 $\left\{\left(x^1,\hat{y}^1\right)\ldots\left(x^r,\hat{y}^r\right)\ldots\left(x^R,\hat{y}^R\right)\right\}$

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

- **梯度下降法（Gradient Descent）**

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

- **随机梯度下降法（Stochastic Gradient Descent）**

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

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

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

4.3 梯度下降法

随机梯度下降法

```
输入: 训练集 𝒟 = {(x^(n), y^(n))}_{n=1}^N, 验证集 𝒱, 学习率 α
随机初始化 θ;
repeat
    对训练集 𝒟 中的样本随机重排序;
    for n = 1 ⋯ N do
        从训练集 𝒟 中选取样本 (x^(n), y^(n));
        // 更新参数
        θ ← θ − α ∂ℒ(θ; x^(n), y^(n)) / ∂θ;
    end
until 模型 f(x; θ) 在验证集 𝒱 上的错误率不再下降;
输出: θ
```

$$\theta \leftarrow \theta - \alpha \frac{\partial \mathcal{L}\left(\theta; x^{(n)}, y^{(n)}\right)}{\partial \theta};$$

4.3 梯度下降法

神经网络为一个复杂的复合函数

对于复杂的复合函数如何计算梯度？

采用链式法则

4.3 梯度下降法

◆ 复合函数梯度

函数：y=h(g(x)) ，求 min h(g(x))

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

y=h(g(x))

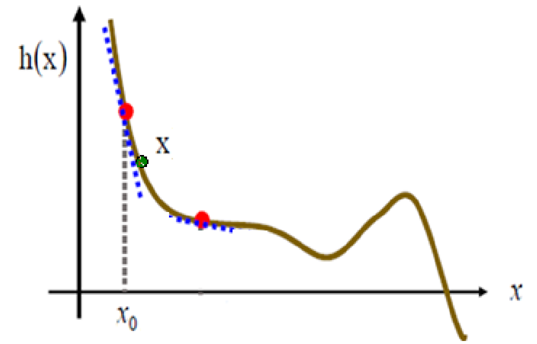
链式法则：

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

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

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

函数：y=h(x)，求 min h(x)



$$h(x_1)=h(x_0)+h'(x_0)(x_1-x_0)$$

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

4.3 梯度下降法

◆ 高维参数梯度

函数：y=h(g(x,w)) ，求 min h(g(x,w))

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

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

y=h(g(x, w))

链式法则：

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

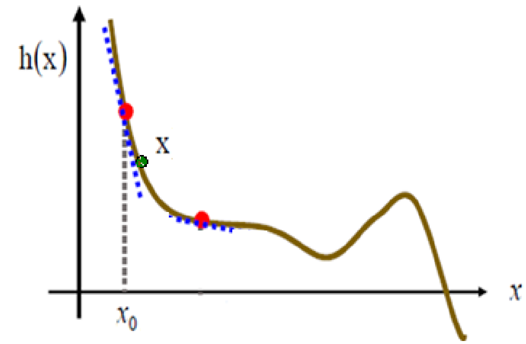
$$\Delta x \to \Delta z \to \Delta y$$

$$\Delta w \to \Delta z \to \Delta y$$

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

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

函数：y=h(x)，求 min h(x)



$$h(x_1) = h(x_0) + h'(x_0)(x_1 - x_0)$$

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

4.3 梯度下降法

◆ 复合函数梯度

函数：z=k(g(s),h(s)) ，求 min k(g(s),h(s))

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

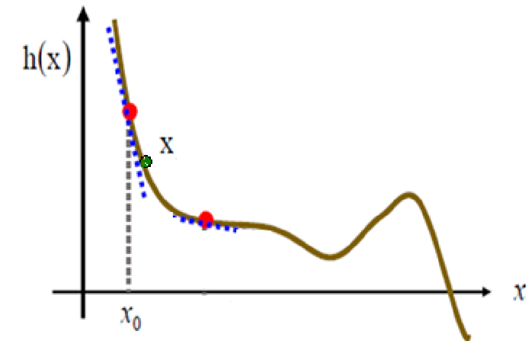
z=k(g(s),h(s))

链式法则：

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

$$\begin{tikzcd} & \Delta x \arrow[dr] & \\ \Delta s \arrow[ur] \arrow[dr] & & \Delta z \\ & \Delta y \arrow[ur] & \end{tikzcd} \qquad \frac{\partial z}{\partial s} = \frac{\partial z}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial s} + \frac{\partial z}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial s}$$

函数：y=h(x)，求 min h(x)



$$h(x_1) = h(x_0) + h'(x_0)(x_1 - x_0)$$

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

内 容 提 要

4.1　神经元模型

4.2　前馈神经网络

4.3　梯度下降法

4.4　反向传播算法

4.5　梯度消失问题

4.6　示例

4.4 反向传播算法

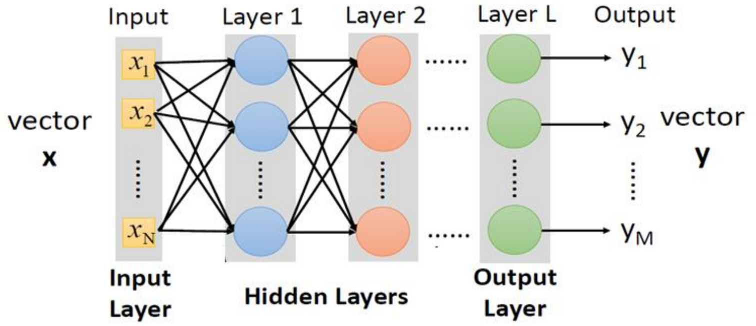
反向传播算法 (Back Propagation) ★前馈神经网络的学习算法

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



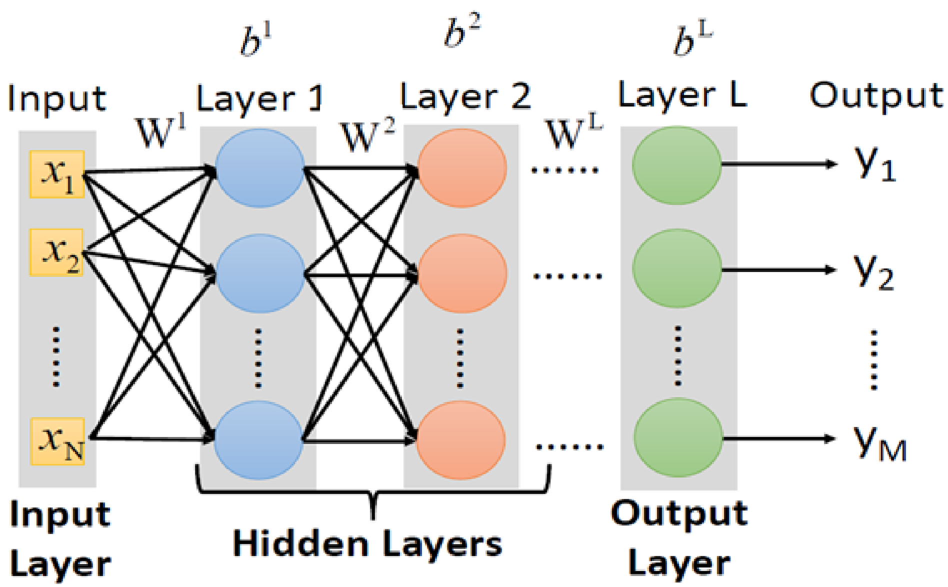
4.4 反向传播算法

■ 定义目标函数（损失函数）

有监督训练

给定实例（ x^i , $\hat{y}^i$ ）

输入： x^i



标准输出： $\hat{y}^i$

模型输出： y^i

损失函数：

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

目标：

$$\theta^* = arg \min_{\theta} C(\theta)$$

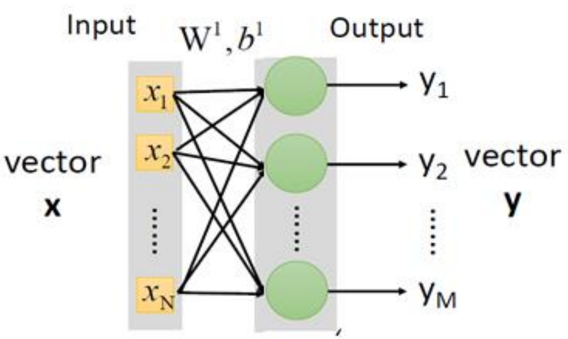
$$y=f(x)=\sigma\left(W^L\ldots\sigma\left(W^2\sigma\left(W^1x+b^1\right)+b^2\right)\ldots+b^L\right)$$

$\theta=\{W^1, b^1, W^2, b^2 \ldots W^L, b^L\}$

4.4 反向传播算法

给定训练数据 $\{(x^1,\hat{y}^1)\ldots(x^r,\hat{y}^r)\ldots(x^R,\hat{y}^R)\}$

单层神经网



$$Y=\sigma\ (W^1X+b^1) \qquad \theta=\{W^1,b^1\}$$

损失函数：

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

$$=\frac{1}{R}\sum_r \left\| \sigma\ (W^1X+b^1)-\hat{y}^r \right\|$$

梯度下降：

$$-\eta\frac{\partial C(\theta)}{\partial b^0}$$

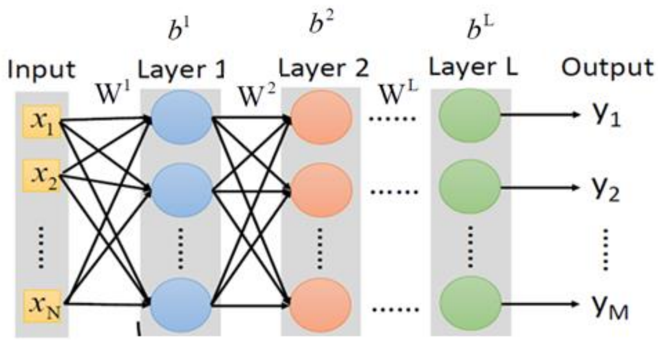
$$W^1 \longleftarrow W^0-\eta\frac{\partial C(\theta)}{\partial w0}$$

$$b^1 \longleftarrow b^0-\eta\frac{\partial C(\theta)}{\partial b0}$$

4.4 反向传播算法

给定训练数据 $\{(x^1,\hat{y}^1)\ldots(x^r,\hat{y}^r)\ldots(x^R,\hat{y}^R)\}$

多层神经网



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

$\theta=\{W^1, b^1, W^2, b^2\ldots W^L, b^L\}$

损失函数：

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

$$=\frac{1}{R}\sum_r\left\|\sigma\left(W^L\ldots\sigma\left(W^2\sigma\left(W^1x+b^1\right)+b^2\right)\ldots+b^L\right)-\hat{y}^r\right\|$$

梯度下降：

$$\theta^*=arg\min_\theta C(\theta)$$

$$[W^l]^1 \longleftarrow [W^l]^0-\eta\frac{\partial C(\theta)}{\partial wl}$$

$$[b^l]^1 \longleftarrow [b^l]^0-\eta\frac{\partial C(\theta)}{\partial bl}$$

y=h(g(x))　min h(g(x))

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

链式法则：

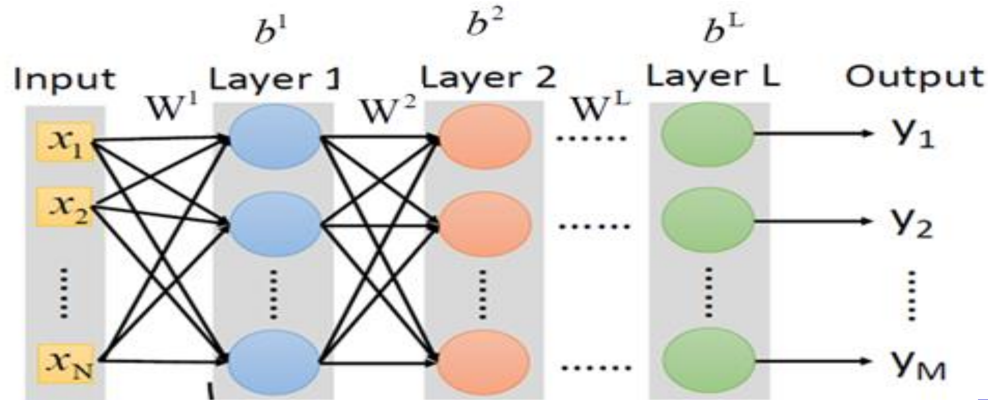
$$y=h(z)\quad z=g(x)$$

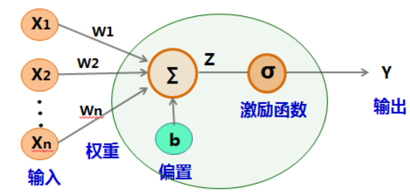
$$\Delta x\rightarrow\Delta z\rightarrow\Delta y$$

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

4.4 反向传播算法

DNN参数层级关系：





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

损失函数：

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

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

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

$$\Delta W^1 \rightarrow \Delta Z^{(1)} \rightarrow \Delta a^{(1)} \rightarrow \Delta Z^{(2)} \rightarrow \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \Delta Z^{(L)} \rightarrow \Delta a^{(L)} \rightarrow \Delta Y \rightarrow \Delta C\ (\theta)$$

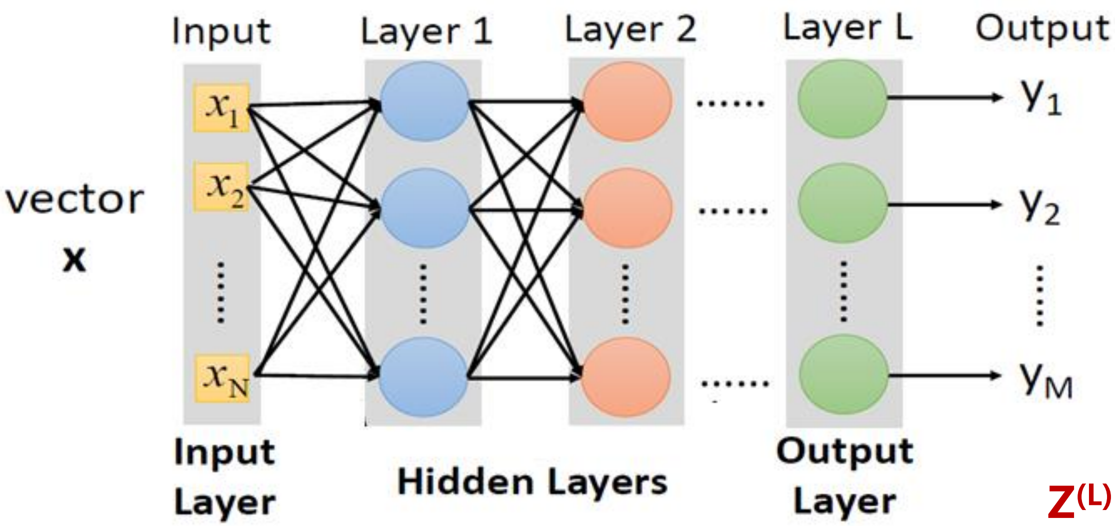
$$\Delta W^2 \rightarrow \Delta Z^{(2)} \rightarrow \Delta a^{(2)} \rightarrow \Delta Z^{(3)} \rightarrow \ldots\ldots\ \Delta Z^{(L)} \rightarrow \Delta a^{(L)} \rightarrow \Delta Y \rightarrow \Delta C\ (\theta)$$

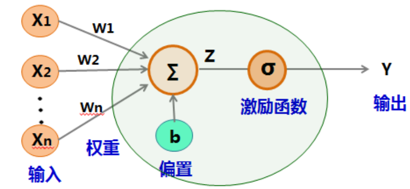
....

$$\Delta W^L \rightarrow \Delta Z^{(L)} \rightarrow \Delta a^{(L)} \rightarrow \Delta Y \rightarrow \Delta C\ (\theta)$$

4.4 反向传播算法

参数调整：





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

$$\Delta W^1 \rightarrow \Delta Z^{(1)} \rightarrow \Delta a^{(1)} \rightarrow \Delta Z^{(2)} \rightarrow \ldots\ldots\ldots\ldots \Delta Z^{(L)} \rightarrow \Delta a^{(L)} \rightarrow \Delta Y \rightarrow \Delta C(\theta)$$

$$\Delta W^2 \rightarrow \Delta Z^{(2)} \rightarrow \Delta a^{(2)} \rightarrow \Delta Z^{(3)} \rightarrow \ldots\ldots \Delta Z^{(L)} \rightarrow \Delta a^{(L)} \rightarrow \Delta Y \rightarrow \Delta C(\theta)$$

....

$$\Delta W^L \rightarrow \Delta Z^{(L)} \rightarrow \Delta a^{(L)} \rightarrow \Delta Y \rightarrow \Delta C(\theta)$$

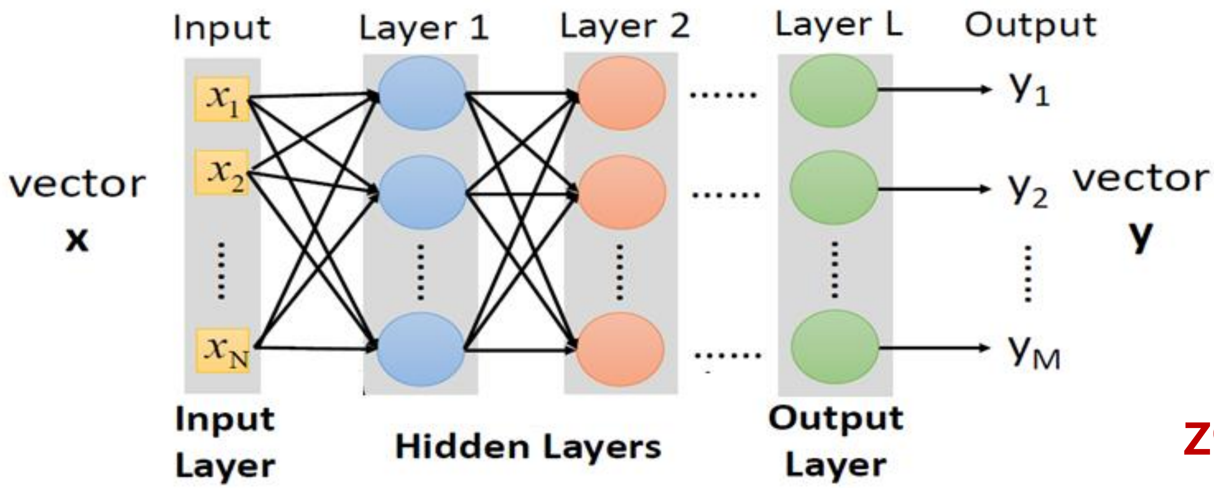
梯度下降法调各层参数

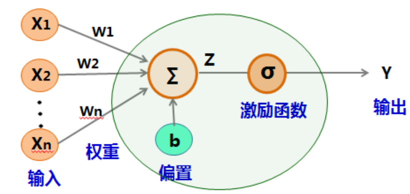
$$[W^l]^1 \longleftarrow [W^l]^0 - \eta \frac{\partial C(\theta)}{\partial W^l}$$

$$\frac{\partial C(\theta)}{\partial W^l} = \underbrace{\boxed{\frac{\partial z^l}{\partial W^l}}}_{} {}^{a^{l-1}} \frac{\partial C(\theta)}{\partial z^l} = a^{l-1} \boxed{\frac{\partial C(\theta)}{\partial z^l}}\ ?$$

4.4 反向传播算法

求： $\frac{\partial C(\theta)}{\partial Z^l}$





$$Y^L = \sigma(Z^L)$$

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

$$\Delta W^1 \rightarrow \Delta Z^{(1)} \rightarrow \Delta a^{(1)} \rightarrow \Delta Z^{(2)} \rightarrow \ldots\ldots\ldots\ldots \Delta Z^{(L)} \rightarrow \Delta a^{(L)} \rightarrow \Delta Y \rightarrow \Delta C(\theta)$$

$$\Delta W^2 \rightarrow \Delta Z^{(2)} \rightarrow \Delta a^{(2)} \rightarrow \Delta Z^{(3)} \rightarrow \ldots\ldots \Delta Z^{(L)} \rightarrow \Delta a^{(L)} \rightarrow \Delta Y \rightarrow \Delta C(\theta)$$

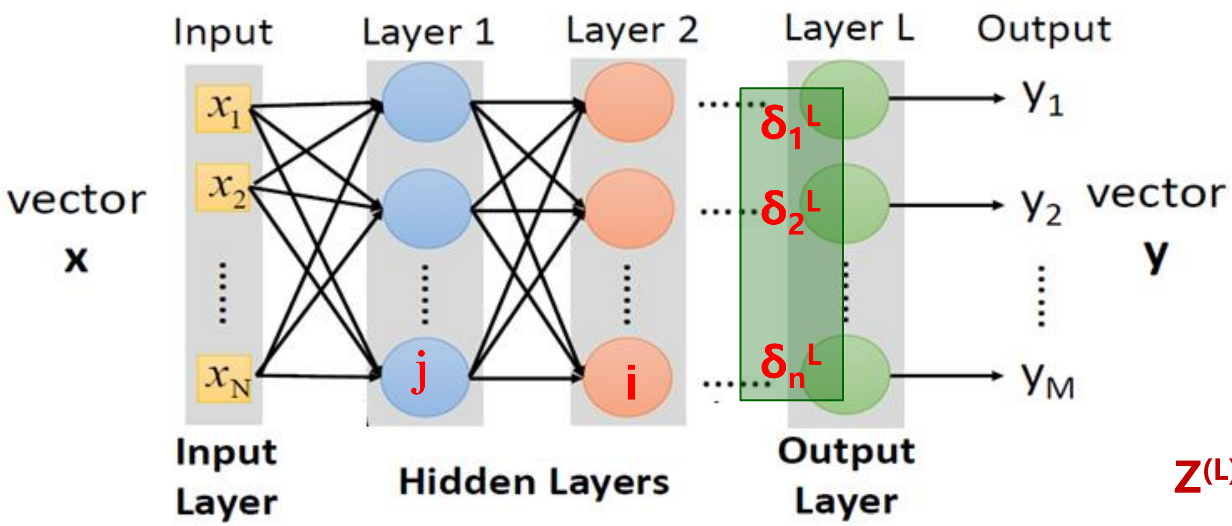
$$\ldots\ldots$$

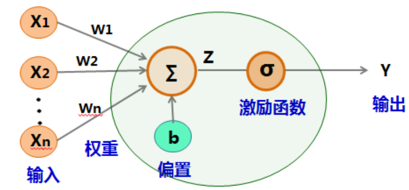
$$\Delta W^L \rightarrow \Delta Z^{(L)} \rightarrow \Delta a^{(L)} \rightarrow \Delta Y \rightarrow \Delta C(\theta)$$

定义一个误差项 δ^l　　$\frac{\partial C(\theta)}{\partial Z^l} = \delta^l$　　**先求最后一层误差** δ^L

4.4 反向传播算法

最后层一个误差 δ^L





损失函数：

$$C(\theta)=\frac{1}{R}\sum_r \| y^r - \hat{y}^r \|$$

$$Y^L = \sigma(Z^L)$$

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

$\Delta W^1 \rightarrow \Delta Z^{(1)} \rightarrow \Delta a^{(1)} \rightarrow \Delta Z^{(2)} \rightarrow \ldots\ldots\ldots\ldots \Delta Z^{(L)} \rightarrow \Delta a^{(L)} \rightarrow \Delta Y \rightarrow \Delta C(\theta)$

$\Delta W^2 \rightarrow \Delta Z^{(2)} \rightarrow \Delta a^{(2)} \rightarrow \Delta Z^{(3)} \rightarrow \ldots\ldots \Delta Z^{(L)} \rightarrow \Delta a^{(L)} \rightarrow \Delta Y \rightarrow \Delta C(\theta)$

....

$\Delta W^L \rightarrow \Delta Z^{(L)} \rightarrow \Delta a^{(L)} \rightarrow \Delta Y \rightarrow \Delta C(\theta)$

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

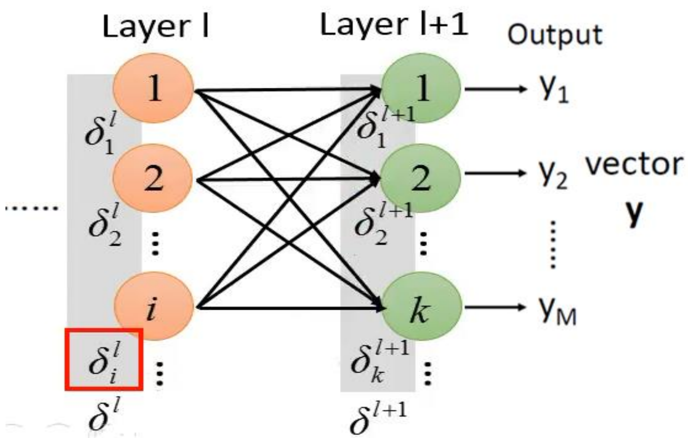
$$C(\theta)=\frac{1}{R}\sum_r \| y^r - \hat{y}^r \|$$

$$\sigma'(Z^L)$$

$$\delta^L = \sigma'(z^l) \bullet \nabla C^r(y^r)$$

4.4 反向传播算法

l 层误差 δ^l 与 l +1 层误差 δ^{l+1} 的关系（关键步骤）



损失函数：

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

$$\delta_i^l=\frac{\partial C^r}{\partial z_i^l}$$

$$\begin{tikzcd}
 & & \Delta z_1^{l+1} \arrow[dr, dotted] & \\
\Delta z_i^l \arrow[r] & \Delta a_i^l \arrow[ur] \arrow[r] \arrow[dr] & \Delta z_2^{l+1} \arrow[r, dotted] & \Delta C^r \\
 & & \Delta z_k^{l+1} \arrow[ur, dotted] &
\end{tikzcd}$$

链式法则：

$x=g(s)$　　$y=h(s)$　　$z=k(x,y)$

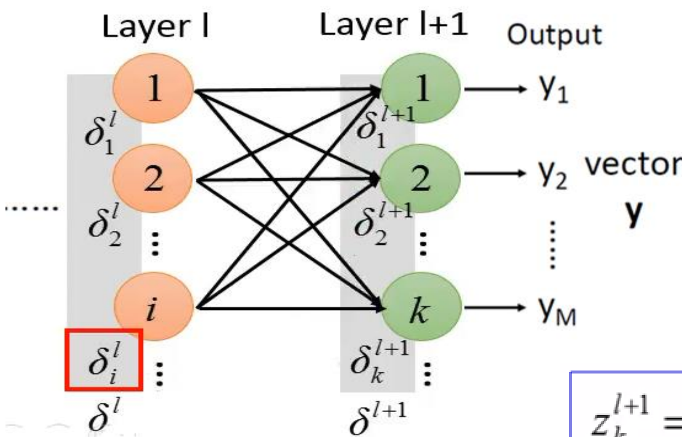
$$\begin{tikzcd}
 & \Delta x \arrow[dr] & \\
\Delta s \arrow[ur] \arrow[dr] & & \Delta z \\
 & \Delta y \arrow[ur] &
\end{tikzcd}$$

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

$$\boxed{\delta_i^l=\frac{\partial C^r}{\partial z_i^l}=\frac{\partial a_i^l}{\partial z_i^l}\sum_k\frac{\partial z_k^{l+1}}{\partial a_i^l}\frac{\partial C^r}{\partial z_k^{l+1}}}$$

4.4 反向传播算法

l 层误差 δ^l 与 l +1 层误差 δ^{l+1} 的关系



损失函数：

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

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

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

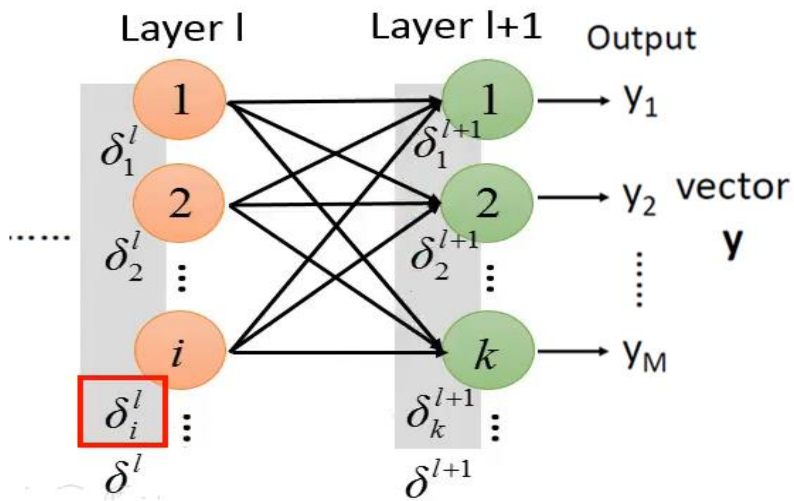
$$\boxed{z_k^{l+1}=\sum_i w_{ki}^{l+1}a_i^l+b_k^{l+1}}$$

$$\delta_i^l=\frac{\partial C^r}{\partial z_i^l}=\underbrace{\boxed{\frac{\partial a_i^l}{\partial z_i^l}}}_{\sigma'\left(z_i^l\right)}\sum_k\underbrace{\boxed{\frac{\partial z_k^{l+1}}{\partial a_i^l}}}_{w_{ki}^{l+1}}\underbrace{\boxed{\frac{\partial C^r}{\partial z_k^{l+1}}}}_{\delta_k^{l+1}}=\sigma'\left(z_i^l\right)\sum_k w_{ki}^{l+1}\delta_k^{l+1}$$

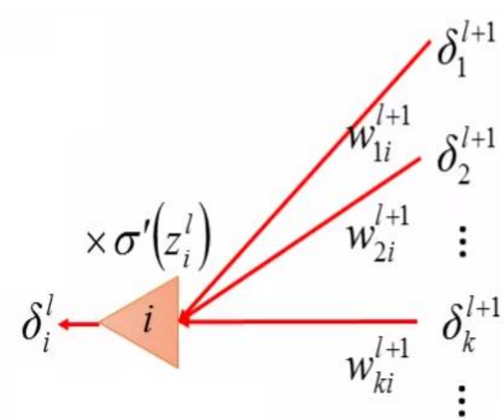
$$\boxed{\delta_i^l=\sigma'\left(z_i^l\right)\sum_k w_{ki}^{l+1}\delta_k^{l+1}}$$

4.4 反向传播算法

根据 δ^{l+1} 求 δ^{l} （误差反传）

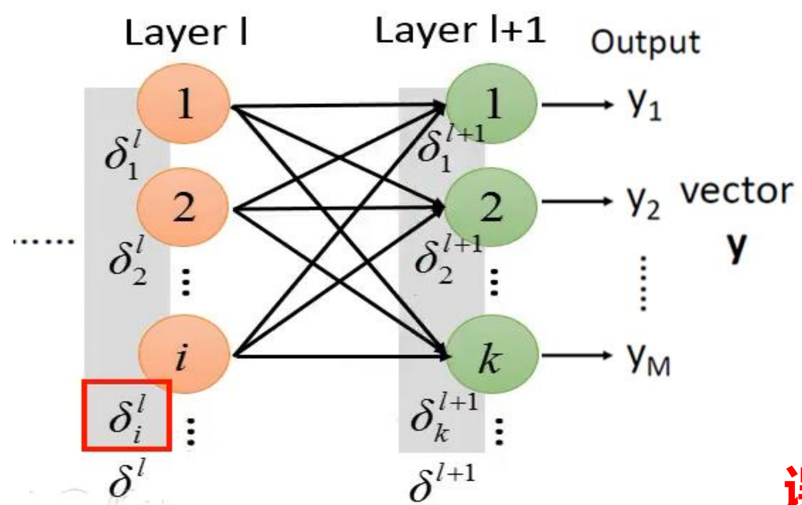


$$\delta_i^l = \sigma'\left(z_i^l\right)\sum_k w_{ki}^{l+1}\delta_k^{l+1}$$

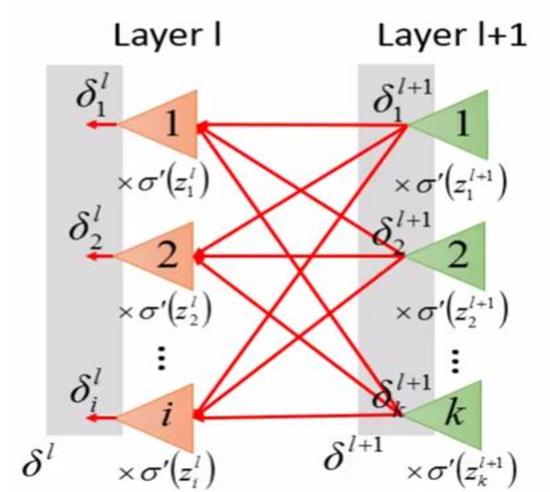


4.4 反向传播算法

根据 δ^{l+1} 求 δ^l （误差反传）



$$\delta_i^l = \sigma'\left(z_i^l\right)\sum_k w_{ki}^{l+1}\delta_k^{l+1}$$



误差反传公式

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

$$\sigma'\left(z^l\right)=\begin{bmatrix}\sigma'\left(z_1^l\right)\\ \sigma'\left(z_2^l\right)\\ \vdots\\ \sigma'\left(z_i^l\right)\\ \vdots\end{bmatrix}$$

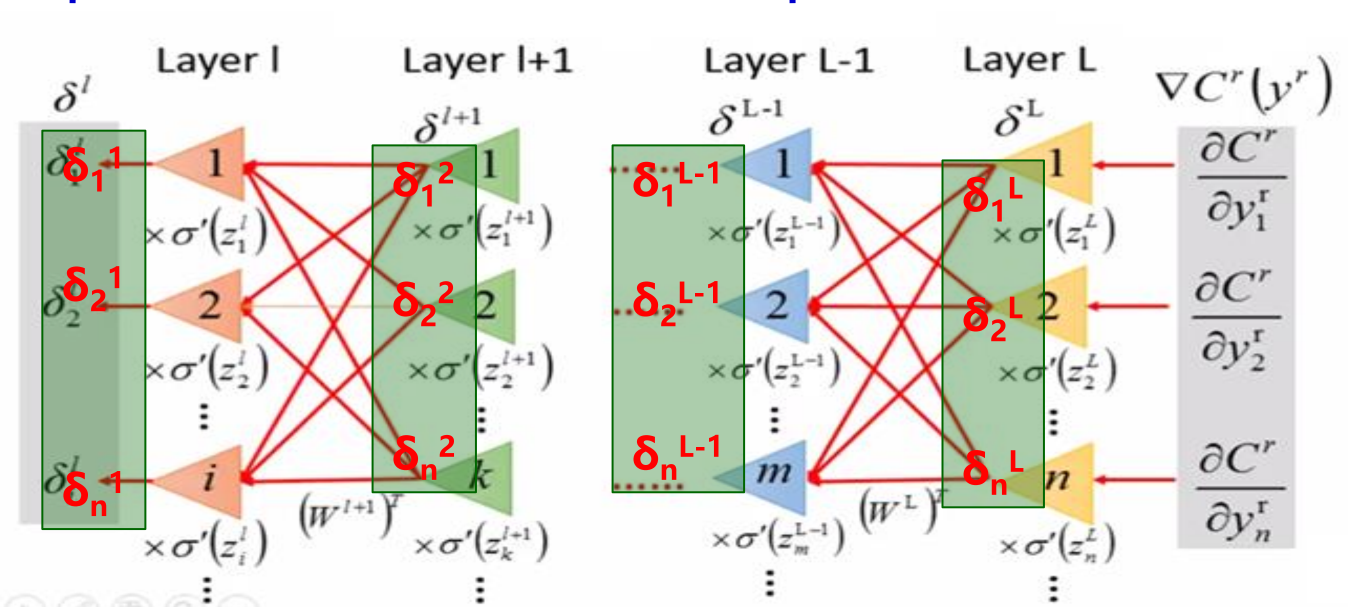
4.4 反向传播算法

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。

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

$$\boxed{\delta^L = \sigma'(z^l)\bullet \nabla C^r(y^r)}$$

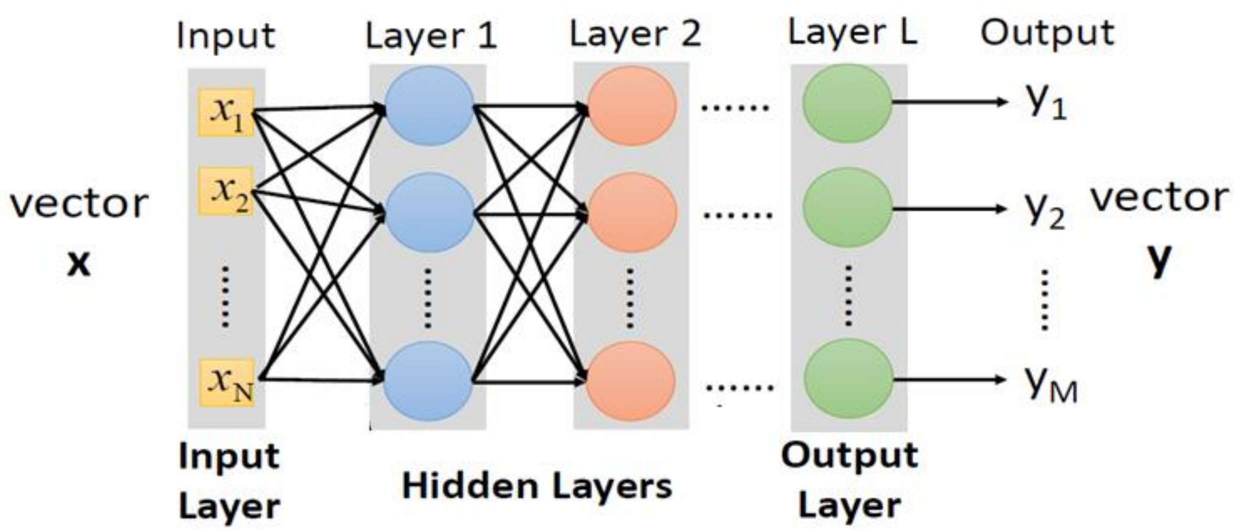


4.4 反向传播算法

参数调整：

损失函数：

$$C(\theta)=\frac{1}{R}\sum_{r}\| y^{r}-\hat{y}^{r}\|$$



$\Delta W^{1} \to \Delta Z^{(1)} \to \Delta a^{(1)} \to \Delta Z^{(2)} \to \ldots\ldots \Delta Z^{(L)} \to \Delta a^{(L)} \to \Delta Y \to \Delta C(\theta)$

$\Delta W^{2} \to \Delta Z^{(2)} \to \Delta a^{(2)} \to \Delta Z^{(3)} \to \ldots\ldots \Delta Z^{(L)} \to \Delta a^{(L)} \to \Delta Y \to \Delta C(\theta)$

$\ldots\ldots$

$\Delta W^{L} \to \Delta Z^{(L)} \to \Delta a^{(L)} \to \Delta Y \to \Delta C(\theta)$

梯度下降法调各层参数

$$[W^l]^1 \longleftarrow [W^l]^0 - \eta \frac{\partial C(\theta)}{\partial W^l}$$

$$\frac{\partial C(\theta)}{\partial W^l} = \frac{\partial z^l}{\partial W^l}\frac{\partial C(\theta)}{\partial z^l} = a^{l-1}\ \delta^l$$

4.4 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

4.4 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;

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

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

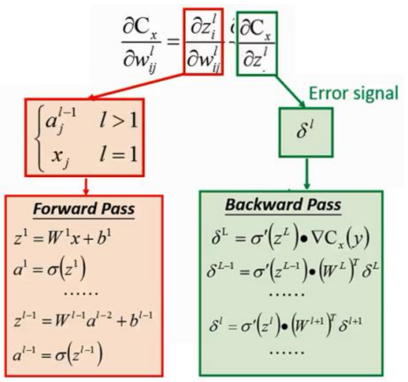
    (4) 更新参数;

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

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

  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)

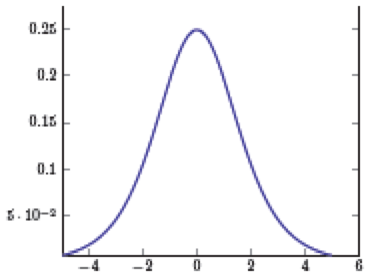
$$\delta^l = \sigma'(z^l) \bullet (W^{l+1})^T \delta^{l+1}$$

内 容 提 要

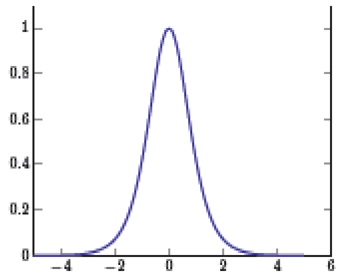
4.5 梯度消失问题

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。当用 sigmoid 或 thanh 函数时：



logistic 函数的导数



tanh 函数的导数

$\sigma'(x) = \sigma(x)(1-\sigma(x)) \in [0, 0.25]$

$\tanh'(x)=1-(\tanh(x))^2 \in [0, 1]$

这样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**

4.5 梯度消失问题

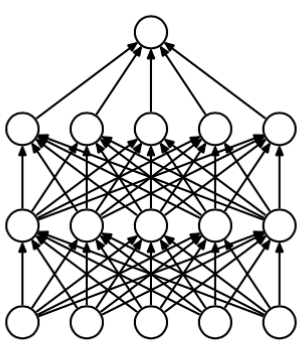
解决梯度梯度消失问题方法

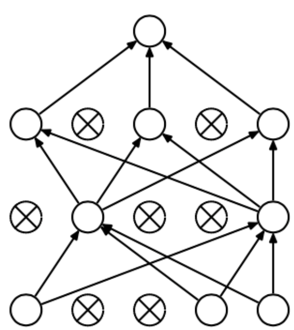
- 选择合适的激活函数
- 用复杂的门结构代替激活函数
- 残差结构

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





内 容 提 要

4.1　神经元模型

4.2　前馈神经网络

4.3　梯度下降法

4.4　反向传播算法

4.5　梯度消失问题

4.6　 示例

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

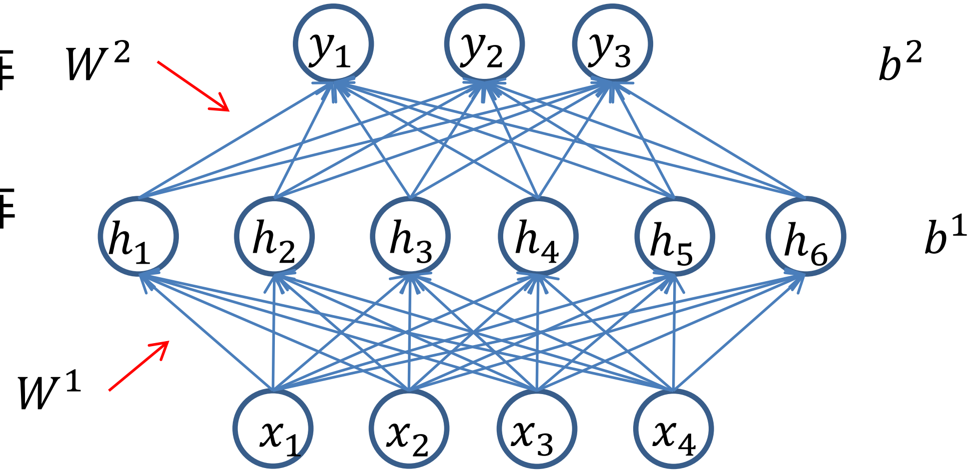
将每个类别的前40个，共120个实例组成训练集，其余30个实例组成测试集。

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。
  - 输出层神经元数量：3，对应目标类别的数量。

$\boldsymbol{a} \epsilon [\mathbf{1}, \mathbf{10}]$

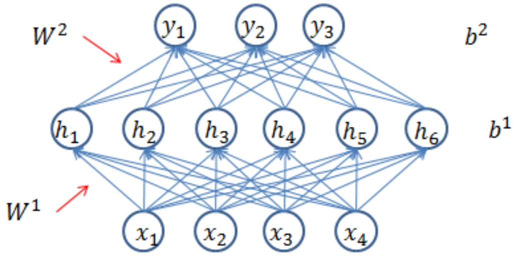
- **输入、输出、参数**
  - x表示模型输入
  - H表示隐含状态
  - y表示模型输出
  - W^1表示输入-隐含层权值矩阵
  - b^1表示隐含层偏置
  - W^2表示隐含-输出层权值矩阵
  - b^2表示输出层偏置



模型结构

- 参数包括 W^1，b^1，W^2，b^2。

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



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

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

模型结构

运算关系:

-- 隐含层

$$h_1 = sigmoid((\sum_{i=1}^{4} x_i W_{(i,1)}^1) + b_1^1)$$

隐含层神经元向量化表示为:

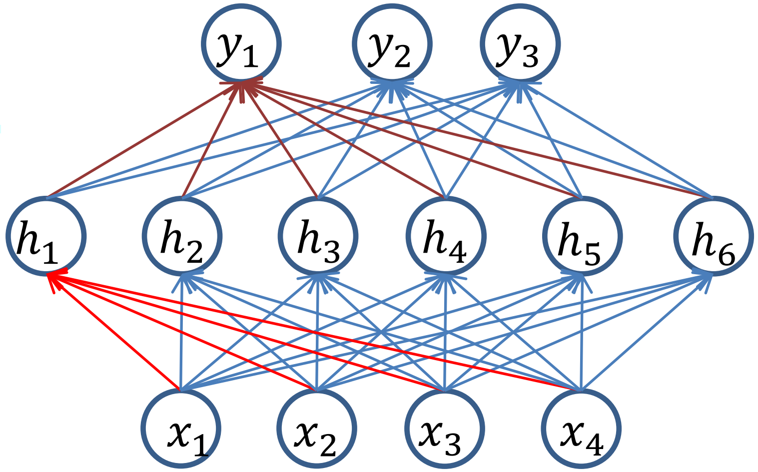
$$H = sigmoid(xW^1 + b^1)$$

--输出层

$$(y_{pred} \sim Z)_1 = \sum_{i=1}^{6} h_i W_{(i,1)}^2 + b_1^2$$

输出层神经元向量化表示为:

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



模型学习

梯度下降法训练模型参数

定义损失函数

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

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

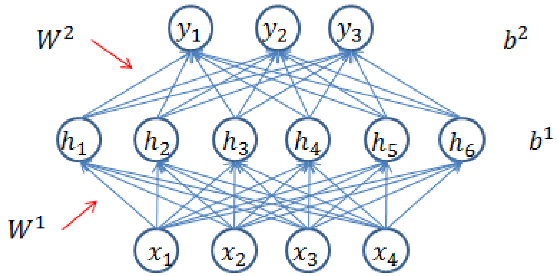
初始化参数： W^1， b^1， W^2， b^2。

用BP算法训练参数 $\boldsymbol{W^1}$， $\boldsymbol{b^1}$， $\boldsymbol{W^2}$， $\boldsymbol{b^2}$。

模型学习

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]
```



问题预测

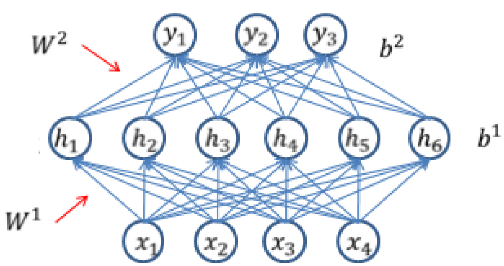
- **测试数据**

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)

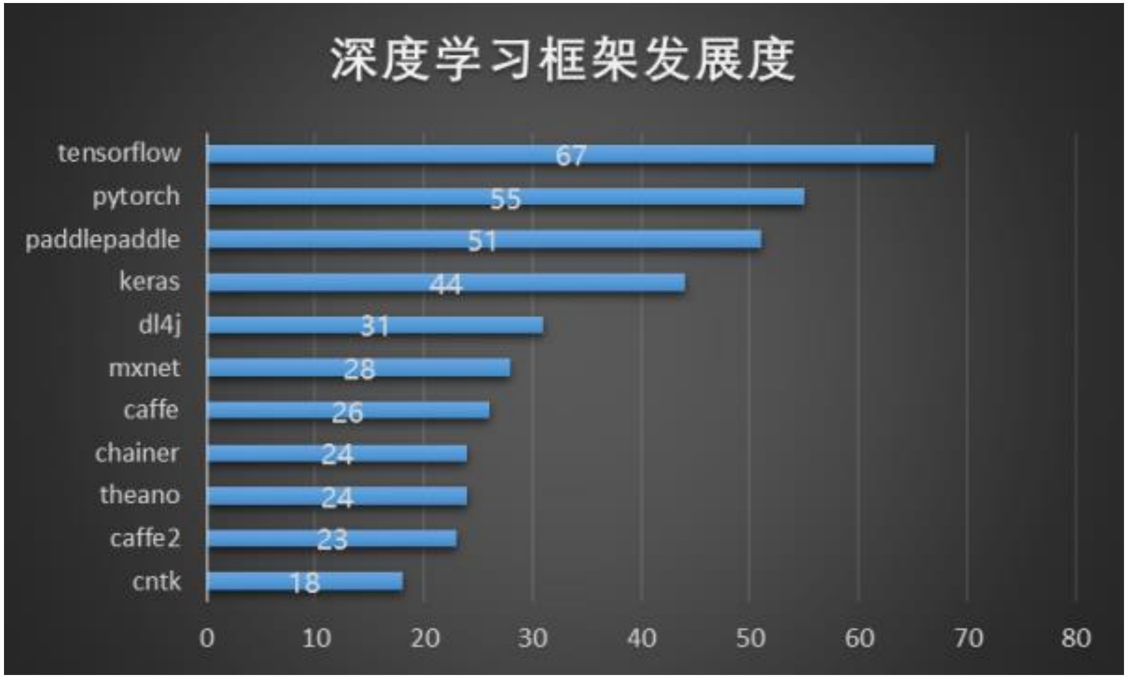
深度学习框架(开源)

十大深度学习框架

框架	发布时间	公司	开发语言
pytorch	2016	facebook	c++、lua
tensorflow	2015	google	c++
paddlepaddle	2016	baidu	c++
mxnet	2017	apache	c++
dl4j	2014	eclipse	java
caffe2	2017	facebook	c++
caffe	2014	berkeley vision	c++
cntk	2016	microsoft	c++
theano	2007	MILA	python
keras	2015	google	python
chainer	2015	chainer	python

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！

谢谢各位！

Q&A