

# lec3

## 参数更新公式

$$\theta^{(t+1)} = \theta^{(t)} - \alpha \nabla_{\theta^{(t)}} J$$

说明:  
在第  $t+1$  步更新参数时,我们沿损失函数  $J$  的负梯度方向(下降最快方向)移动一小步(由学习率  $\alpha$  控制),逐步降低损失函数值.

## 简单神经网络前向传播

$\mathbf{x}$  : 输入向量  
 $\mathbf{h} = f(\mathbf{W}\mathbf{x} + \mathbf{b})$  (激活函数  $f$ )  
 $s = \mathbf{u}^T \mathbf{h}$  (输出得分)  
 $J_t(\theta) = -\log \sigma(s)$  (交叉熵损失)  
其中  $\sigma(s) = \frac{1}{1 + \exp(-s)} \in (0, 1]$

- 注:
- 最终输出通过 sigmoid 将得分映射为概率
  - 损失函数应为负对数似然(修正原始公式)
  - 完整训练需结合反向传播算法优化参数

## 常见 Non-linearities(激活函数)

名称	公式	图像特点	优点	缺点
Sigmoid	$\sigma(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}}$	S 型曲线,输出在 (0,1)	可解释为概率	梯度消失、不以零为中心
Tanh	$\tanh(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}}$	S 型曲线,输出在 (-1,1)	输出均值接近 0	仍有梯度消失问题
ReLU(Rectified Linear Unit)	$\text{ReLU}(x) = \max(0, x)$	左侧为 0,右侧为直线	计算高效,缓解梯度消失	负数部分无响应,神经元可能死亡

名称	公式	图像特点	优点	缺点
Leaky ReLU	$\text{Leaky ReLU}(x) = \begin{cases} x & x > 0 \\ \alpha x & x \leq 0 \end{cases}$	类似 ReLU, 但负值有小斜率	解决 ReLU 死区问题	参数 $\alpha$ 需要调参
ELU	$\text{ELU}(x) = \begin{cases} x & x > 0 \\ \alpha(e^x - 1) & x \leq 0 \end{cases}$	左侧指数下降, 右侧为直线	输出均值接近 0, 收敛快	计算稍复杂
Swish	$\text{Swish}(x) = x \cdot \sigma(x)$	自门控结构, 平滑连续	性能优于 ReLU	计算成本高
GELU	$\text{GELU}(x) = x \cdot \Phi(x)$	类似 Swish, 基于正态分布	表现优秀, 广泛用于 Transformer	计算较复杂
Softmax	$\text{Softmax}(x_i) = \frac{e^{x_i}}{\sum_j e^{x_j}}$	多分类输出归一化为概率分布	常用于最后一层	不适合作为隐藏层激活函数

### Non-linearities, old and new

logistic (“sigmoid”)

$$f(z) = \frac{1}{1 + \exp(-z)}$$

tanh

$$\tanh(z) = \frac{e^z - e^{-z}}{e^z + e^{-z}}$$

hard tanh

$$\text{HardTanh}(x) = \begin{cases} -1 & \text{if } x < -1 \\ x & \text{if } -1 \leq x \leq 1 \\ 1 & \text{if } x > 1 \end{cases}$$

(Rectified Linear Unit) ReLU

$$\text{ReLU}(z) = \max(z, 0)$$

Leaky ReLU / Parametric ReLU

tanh is just a rescaled and shifted sigmoid ( $2 \times$  as steep,  $[-1, 1]$ ):

$$\tanh(z) = 2\text{logistic}(2z) - 1$$

Logistic and tanh are still used (e.g., logistic to get a probability)

However, now, for deep networks, the first thing to try is ReLU: it trains quickly and performs well due to good gradient backflow.

ReLU has a negative “dead zone” that recent proposals mitigate

GELU is frequently used with Transformers (BERT, RoBERTa, etc.)

Swish [arXiv:1710.05941](https://arxiv.org/abs/1710.05941)

$$\text{swish}(x) = x \cdot \text{logistic}(x)$$

GELU [arXiv:1606.08415](https://arxiv.org/abs/1606.08415)

$$\text{GELU}(x) = x \cdot P(X \leq x), X \sim N(0, 1) \approx x \cdot \text{logistic}(1.702x)$$

## 中文翻译

使用“交叉熵损失”进行训练 —— 你在 PyTorch 中经常用到它！

- 到目前为止,我们的目标被表述为:最大化正确类别  $y$  的概率, 或者等价地,最小化该类别的负对数概率。

- 现在我们从信息论中的一个概念——**交叉熵(Cross Entropy)**的角度重新表述这个目标.
- 设真实概率分布为  $p$ ; 模型输出的概率分布为  $q$ .
- 交叉熵定义为:

$$H(p, q) = - \sum_i p_i \log q_i$$

- 假设真实标签(或称为目标、黄金标准)是一个 one-hot 分布,即在正确类别处为 1,其余为 0, 即  $p = [0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0]$ .
- 因为  $p$  是 one-hot 向量,所以只剩下对应正确类别的那一项,即:  
**负对数似然(Negative Log-Likelihood):**  
 $-\log p(y|x)$

## 2.计算

### 梯度与雅可比矩阵

对于标量函数  $f(\mathbf{x}) = f(x_1, \dots, x_n)$ ,其梯度为:

$$f(\mathbf{x}) = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$$

$$\nabla_{\mathbf{x}} f = \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} = \left[ \frac{\partial f}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n} \right]$$

对于向量值函数  $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = [f_1(\mathbf{x}), \dots, f_m(\mathbf{x})]^T$ ,其雅可比矩阵为:

$$\mathbf{J}_f = \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{x}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_m}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial f_m}{\partial x_n} \end{bmatrix}$$

$$\text{其中} \left( \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{x}} \right)_{ij} = \frac{\partial f_i}{\partial x_j}$$

### 反向传播的链式法则示例

设  $h = f(z)$ ,其中每个  $h_i = f(z_i)$ ,则导数为:

$$\frac{\partial h_i}{\partial z_j} = \begin{cases} f'(z_i) & \text{if } i = j \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

对于复合函数  $\mathbf{h} = f(\mathbf{W}\mathbf{x} + \mathbf{b})$ ,链式法则展开为:

$$\frac{\partial \mathbf{h}}{\partial \mathbf{x}} = \underbrace{\frac{\partial \mathbf{h}}{\partial \mathbf{z}}}_{\text{对角矩阵}} \cdot \underbrace{\frac{\partial \mathbf{z}}{\partial \mathbf{x}}}_{\text{权重矩阵 } \mathbf{W}}$$

其中:

- $\mathbf{z} = \mathbf{W}\mathbf{x} + \mathbf{b}$
- $\frac{\partial \mathbf{h}}{\partial \mathbf{z}}$  是对角矩阵,对角线元素为  $f'(z_i)$
- $\frac{\partial \mathbf{z}}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{W}$

反向传播的具体计算见 pdf 文件