卷积神经网络的前向传播、反向传播算法理论推导

由题知，输入特征图X的尺寸为3×3，因此可设为$\begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & x_{13} \\ x_{21} & x_{22} & x_{23} \\ x_{31} & x_{32} & x_{33} \end{pmatrix}$；卷积核$W$的尺寸为$2\times2$，因此可设为$\begin{pmatrix} w_{11} & w_{12} \\ w_{21} & w_{22} \end{pmatrix}$。另外，可设偏置$b$为$\begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix}$，输出特征图$Y$为$\begin{pmatrix} y_{11} & y_{12} \\ y_{21} & y_{22} \end{pmatrix}$。

1 卷积层前向传播

根据卷积运算的定义，卷积层的前向传播可以通过滑动卷积核在输入特征图上进行**逐元素相乘、叠加求和**得到。对于每一个输出特征图的元素y_{ij}，可以使用以下公式计算：

$$y_{ij} = \sum_{m=1}^{2}\sum_{n=1}^{2} w_{mn} \cdot x_{(i+m-1)(j+n-1)} + b_{ij}$$

根据题目中给出的输入特征图X、卷积核W和偏置b的值，我们可以进行具体的计算。将输入特征图X和卷积核W代入上述公式，得到每个输出特征图元素的计算过程如下：

$$\begin{cases} y_{11} = w_{11} \cdot x_{11} + w_{12} \cdot x_{12} + w_{21} \cdot x_{21} + w_{22} \cdot x_{22} + b_{11} \\ y_{12} = w_{11} \cdot x_{12} + w_{12} \cdot x_{13} + w_{21} \cdot x_{22} + w_{22} \cdot x_{23} + b_{12} \\ y_{21} = w_{11} \cdot x_{21} + w_{12} \cdot x_{22} + w_{21} \cdot x_{31} + w_{22} \cdot x_{32} + b_{21} \\ y_{22} = w_{11} \cdot x_{22} + w_{12} \cdot x_{23} + w_{21} \cdot x_{32} + w_{22} \cdot x_{33} + b_{22} \end{cases}$$

根据以上计算过程，可以得到输出特征图 Y 的结果为：

$$Y = \begin{pmatrix} y_{11} & y_{12} \\ y_{21} & y_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} w_{11} \cdot x_{11} + w_{12} \cdot x_{12} + w_{21} \cdot x_{21} + w_{22} \cdot x_{22} + b_{11} & w_{11} \cdot x_{12} + w_{12} \cdot x_{13} + w_{21} \cdot x_{22} + w_{22} \cdot x_{23} + b_{12} \\ w_{11} \cdot x_{21} + w_{12} \cdot x_{22} + w_{21} \cdot x_{31} + w_{22} \cdot x_{32} + b_{21} & w_{11} \cdot x_{22} + w_{12} \cdot x_{23} + w_{21} \cdot x_{32} + w_{22} \cdot x_{33} + b_{22} \end{pmatrix}$$

这样，我们就完成了卷积层的前向传播计算。

2 卷积层反向传播

设损失函数为L，卷积层的梯度输出为$\frac{\partial L}{\partial Y}$。

卷积层的反向传播需要计算关于输入特征图 X、卷积核 W 和偏置 b 的梯度，即 $\frac{\partial L}{\partial X}$、$\frac{\partial L}{\partial W}$ 和 $\frac{\partial L}{\partial b}$。

首先，我们来推导关于输入特征图的梯度 $\frac{\partial L}{\partial X}$。根据链式法则，可以得到以下推导过程：

$$\frac{\partial L}{\partial X} = \frac{\partial L}{\partial Y} \cdot \frac{\partial Y}{\partial X}$$

其中，$\frac{\partial L}{\partial Y}$ 是已知的，我们需要计算 $\frac{\partial Y}{\partial X}$。由于 Y 的每个元素 y_{ij} 是由 X 和 W 相关元素相乘求和得到的，因此可以推导出以下计算过程：

$$\begin{cases} \frac{\partial L}{\partial x_{11}} = \frac{\partial L}{\partial y_{11}} \cdot w_{11} \\ \frac{\partial L}{\partial x_{12}} = \frac{\partial L}{\partial y_{11}} \cdot w_{12} + \frac{\partial L}{\partial y_{12}} \cdot w_{11} \\ \frac{\partial L}{\partial x_{13}} = \frac{\partial L}{\partial y_{12}} \cdot w_{12} \\ \frac{\partial L}{\partial x_{21}} = \frac{\partial L}{\partial y_{11}} \cdot w_{21} + \frac{\partial L}{\partial y_{21}} \cdot w_{11} \\ \frac{\partial L}{\partial x_{22}} = \frac{\partial L}{\partial y_{11}} \cdot w_{22} + \frac{\partial L}{\partial y_{12}} \cdot w_{21} + \frac{\partial L}{\partial y_{21}} \cdot w_{12} + \frac{\partial L}{\partial y_{22}} \cdot w_{11} \\ \frac{\partial L}{\partial x_{23}} = \frac{\partial L}{\partial y_{12}} \cdot w_{22} + \frac{\partial L}{\partial y_{22}} \cdot w_{12} \\ \frac{\partial L}{\partial x_{31}} = \frac{\partial L}{\partial y_{21}} \cdot w_{21} \\ \frac{\partial L}{\partial x_{32}} = \frac{\partial L}{\partial y_{21}} \cdot w_{22} + \frac{\partial L}{\partial y_{22}} \cdot w_{21} \\ \frac{\partial L}{\partial x_{33}} = \frac{\partial L}{\partial y_{22}} \cdot w_{22} \end{cases}$$

将上述计算结果整理成矩阵形式，即可得到关于输入特征图的梯度 $\frac{\partial L}{\partial X}$。

接下来，我们来推导关于卷积核的梯度 $\frac{\partial L}{\partial W}$。同样使用链式法则，可以得到以下推导过程：

$$\frac{\partial L}{\partial W} = \frac{\partial L}{\partial Y} \cdot \frac{\partial Y}{\partial W}$$

其中，$\frac{\partial L}{\partial Y}$ 是已知的，我们需要计算 $\frac{\partial Y}{\partial W}$。由于 Y 的每个元素 y_{ij} 是由 X 和 W 相关元素相乘求和得到的，可以推导出以下计算过程：

$$\begin{cases} \frac{\partial L}{\partial w_{11}} = \frac{\partial L}{\partial y_{11}} \cdot x_{11} + \frac{\partial L}{\partial y_{12}} \cdot x_{12} + \frac{\partial L}{\partial y_{21}} \cdot x_{21} + \frac{\partial L}{\partial y_{22}} \cdot x_{22} \\ \frac{\partial L}{\partial w_{12}} = \frac{\partial L}{\partial y_{11}} \cdot x_{12} + \frac{\partial L}{\partial y_{12}} \cdot x_{13} + \frac{\partial L}{\partial y_{21}} \cdot x_{22} + \frac{\partial L}{\partial y_{22}} \cdot x_{23} \\ \frac{\partial L}{\partial w_{21}} = \frac{\partial L}{\partial y_{11}} \cdot x_{21} + \frac{\partial L}{\partial y_{12}} \cdot x_{22} + \frac{\partial L}{\partial y_{21}} \cdot x_{31} + \frac{\partial L}{\partial y_{22}} \cdot x_{32} \\ \frac{\partial L}{\partial w_{22}} = \frac{\partial L}{\partial y_{11}} \cdot x_{22} + \frac{\partial L}{\partial y_{12}} \cdot x_{23} + \frac{\partial L}{\partial y_{21}} \cdot x_{32} + \frac{\partial L}{\partial y_{22}} \cdot x_{33} \end{cases}$$

将上述计算结果整理成矩阵形式，即可得到关于卷积核的梯度 $\frac{\partial L}{\partial W}$。

最后，我们来推导关于偏置的梯度 $\frac{\partial L}{\partial b}$。同样使用链式法则，可以得到以下推导过程：

$$\frac{\partial L}{\partial b} = \frac{\partial L}{\partial Y} \cdot \frac{\partial Y}{\partial b}$$

其中，$\frac{\partial L}{\partial Y}$ 是已知的，我们需要计算 $\frac{\partial Y}{\partial b}$。由于 Y 的每个元素 y_{ij} 是通过与偏置 b_{ij} 相加得到的，因此可以得到以下计算过程：

$$\begin{cases} \frac{\partial L}{\partial b_{11}} = \frac{\partial L}{\partial y_{11}} \\ \frac{\partial L}{\partial b_{12}} = \frac{\partial L}{\partial y_{12}} \\ \frac{\partial L}{\partial b_{21}} = \frac{\partial L}{\partial y_{21}} \\ \frac{\partial L}{\partial b_{22}} = \frac{\partial L}{\partial y_{22}} \end{cases}$$

将上述计算结果整理成矩阵形式，即可得到关于偏置的梯度 $\frac{\partial L}{\partial b}$。

不过，卷积层的同一个通道一般使用**相同的偏置值**，即 $b_{11} = b_{12} = b_{21} = b_{22}$ 。在这种情况下，关于偏置的梯度可进一步化为：

$$\frac{\partial L}{\partial b} = \sum_{i=1}^{2} \sum_{j=1}^{2} \frac{\partial L}{\partial y_{ij}}$$

综上所述，我们完成了卷积层的反向传播计算。

3 池化层前向传播

由于使用的是最大池化层，池化核尺寸为2×2，步长为1，无填充，因此池化层的前向传播可以通过滑动池化窗口的方式进行。对于最大池化层，它的作用是对输入特征图进行下采样，保留特征图中每个池化窗口中的**最大值**作为输出。

设$X_1^{'} = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} \\ x_{21} & x_{22} \end{pmatrix}$，$X_2^{'} = \begin{pmatrix} x_{12} & x_{13} \\ x_{22} & x_{23} \end{pmatrix}$，$X_3^{'} = \begin{pmatrix} x_{21} & x_{22} \\ x_{31} & x_{32} \end{pmatrix}$，$X_4^{'} = \begin{pmatrix} x_{22} & x_{23} \\ x_{32} & x_{33} \end{pmatrix}$。

设函数 $max(\cdot)$ 返回的是**矩阵中的最大元素的值**，则可得到输出特征图Y的结果为：

$$Y = \begin{pmatrix} y_{11} & y_{12} \\ y_{21} & y_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} max(X_1^{'}) & max(X_2^{'}) \\ max(X_3^{'}) & max(X_4^{'}) \end{pmatrix}$$

这样，我们就完成了池化层的前向传播计算。

4 池化层反向传播

已知池化层输出Y的梯度为$\frac{\partial L}{\partial Y}$，其中$L$是损失函数。现在我们需要计算关于输入特征图$X$的梯度$\frac{\partial L}{\partial X}$。

池化层的反向传播计算可以通过使用**具有相同的池化窗口大小但将最大值位置标记为1、其他位置标记为0**的掩码矩阵来实现。将该掩码矩阵与池化层输出的梯度相乘，以便将梯度传递回池化层的输入。设掩码矩阵为M_k，则反向传播的计算过程如下：

- 初始化与输入特征图相同尺寸的梯度矩阵$\frac{\partial L}{\partial X}$为全零矩阵。
- 遍历池化层的输出特征图Y的每个元素y_{ij}以及对应的梯度$\frac{\partial L}{\partial y_{ij}}$：
    - 找到与y_{ij}对应的池化窗口$X_k^{'}$，其中k表示池化窗口的索引。
    - 初始化与池化窗口$X_k^{'}$相同尺寸的掩码矩阵M_k为全零矩阵。
    - 在池化窗口$X_k^{'}$中找到最大值的位置，并将该位置在M_k中标记为1，其他位置标记为0。
    - 将$\frac{\partial L}{\partial y_{ij}}$乘以掩码矩阵$M_k$，得到局部梯度$\frac{\partial L}{\partial X_k^{'}} = \frac{\partial L}{\partial y_{ij}} \cdot M_k$。

    - 将局部梯度 $\frac{\partial L}{\partial X_k'}$ 加到 $\frac{\partial L}{\partial X}$ 的相应位置上。
- 得到最终的输入特征图的梯度 $\frac{\partial L}{\partial X}$。