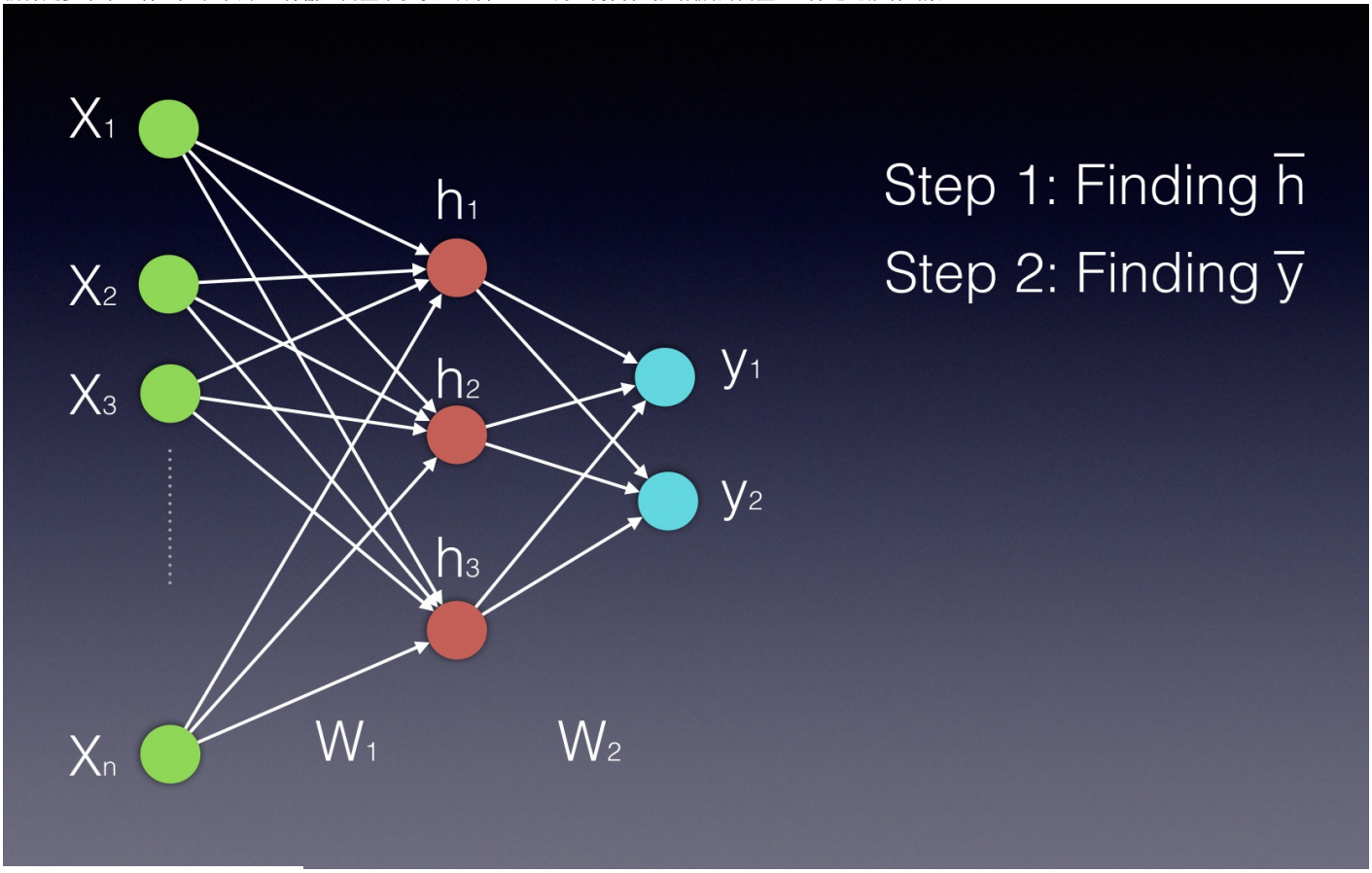
前馈

假设只有一个隐藏层，我们在计算中会需要两个步骤。第一个是计算隐藏状态的数值，第二个是计算输出值。 请注意，隐藏层和输出层都显示为向量，因为它们都是多个单一神经元表示的。 将输入向量乘以权重矩阵W1，可以计算得到隐藏层的向量h，再通过激活函数



$$\bar{h}' = (\bar{x}W^1)$$

我们找到h'后，需要一个激活函数(Φ)来完成隐藏层数值的计算。这个激活函数可以是双曲正切、Sigmoid或ReLU函数。我们可以使用以下两个方程式来表示最终隐藏层的向量：

$$\begin{bmatrix} h_1' & h_2' & h_3' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 & x_3 & \ldots\ldots & x_n \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} W_{11} & W_{12} & W_{13} \\ W_{21} & W_{22} & W_{23} \\ \vdots & & \\ W_{n1} & W_{n2} & W_{n3} \end{bmatrix}$$

$$\bar{h} = \Phi(\bar{x}W^1)$$

或

$$\bar{h} = \Phi(h')$$

由于Wij表示权重矩阵中的权重部分，连接输入中的神经元 ii 和隐藏层的神经元 jj，我们也可以按照以下方式书写计算：(请注意，在这个例子中，我们有 nn 个输入，只有3个隐藏的神经元)

$$h_1 = \Phi(x_1W_{11}+x_2W_{21}+....+x_nW_{n1})$$

$$h_2 = \Phi(x_1W_{12}+x_2W_{22}+....+x_nW_{n2})$$

$$h_3 = \Phi(x_1W_{13}+x_2W_{23}+....+x_nW_{n3})$$

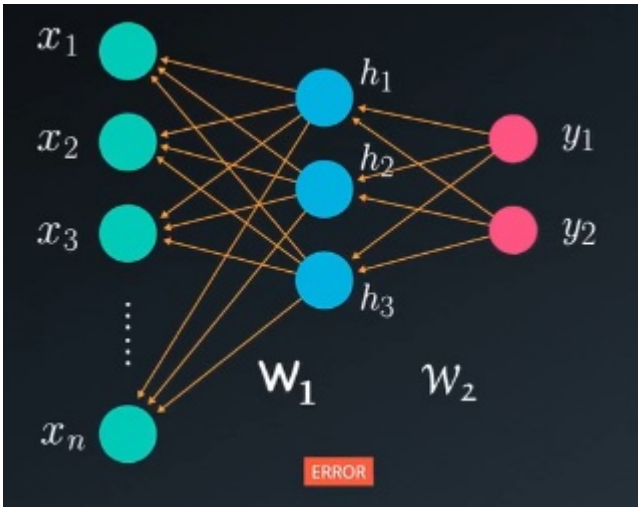
从本质上讲，神经网络中每个新层都是向量乘以矩阵进行计算，其中向量连接了输入和新层，而矩阵连接了新的输入和下一层。

$$\begin{bmatrix} y_1 & y_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} h_1 & h_2 & h_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_{11} & w_{12} \\ w_{21} & w_{22} \\ w_{31} & w_{32} \end{bmatrix}$$

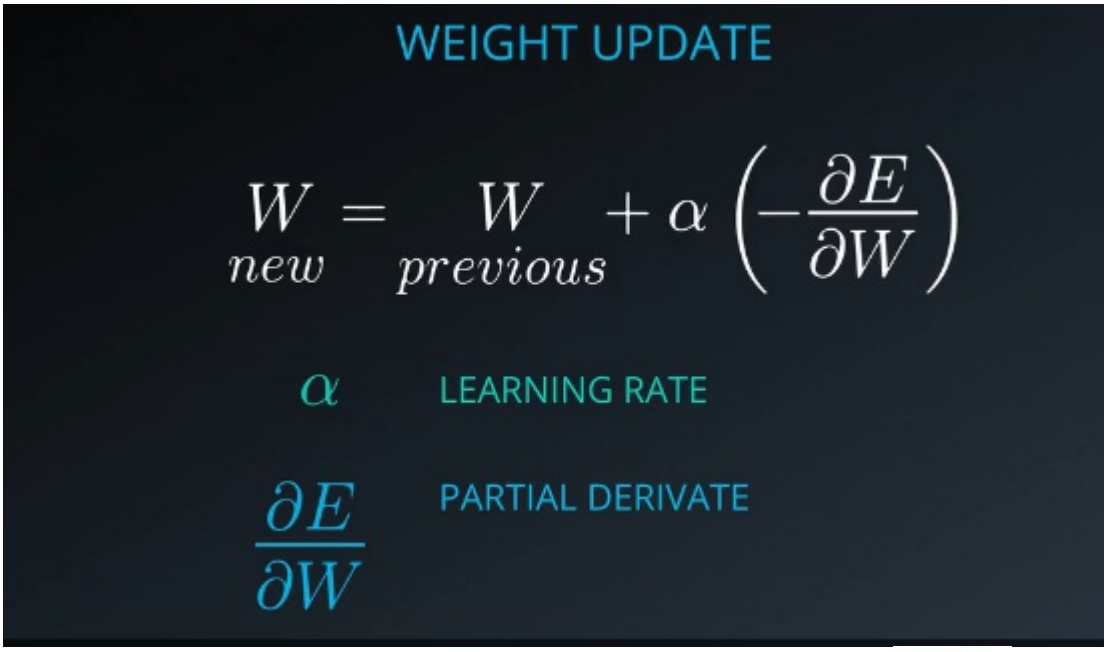
最常用的两个误差函数是均方误差(MSE)(通常用于回归问题)和交叉熵(通常用于分类问题)。

反向传播

向前馈得到了输出值，根据标签得到了误差，然后反过来向后传播，即从最后向之前每一层传播误差



在反向传播算法过程中，我们通过调整权重，利用每次迭代使网络误差最小化。



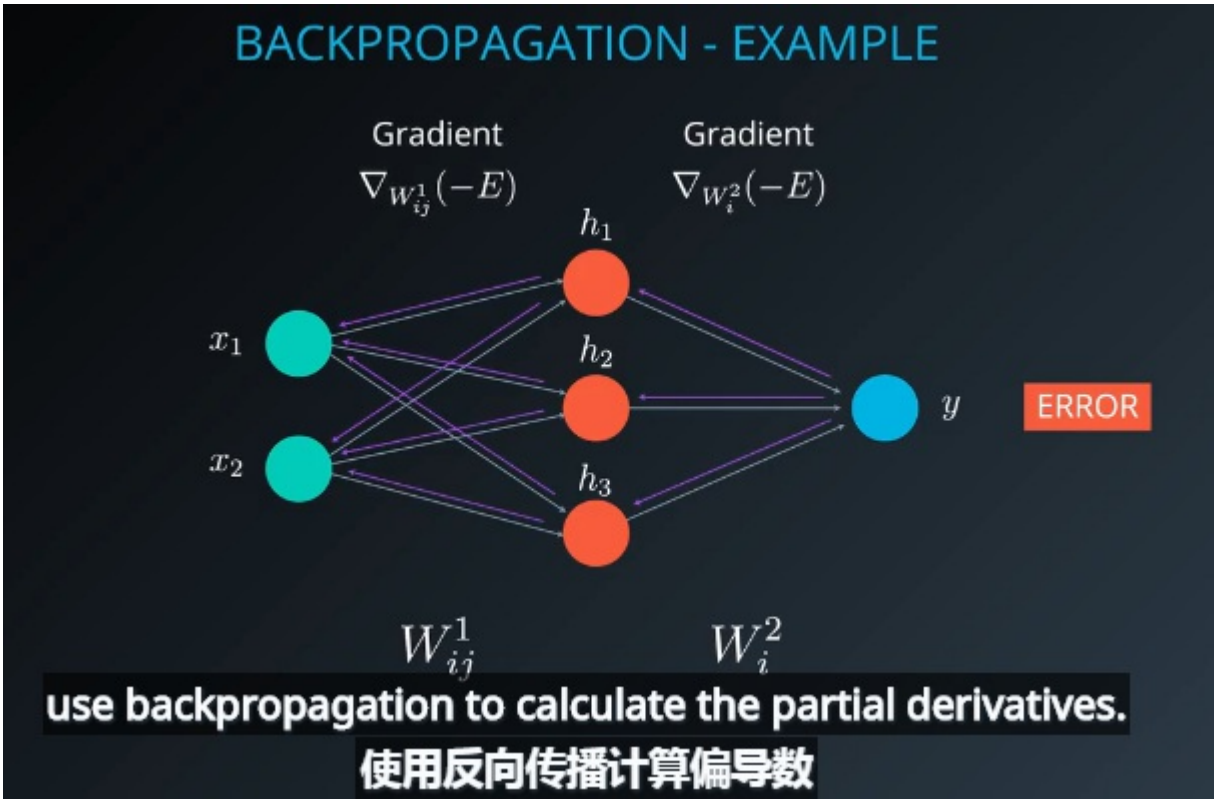
如果我们看一个任意的层k，我们可以定义改变连接 k 层的神经元 i 和神经元 j 的权重数量，具体如下 $\Delta W^k{}_{ij}$上标(k)表示连接 k 层和 k+1 层的权重

因此，这个神经元的权重更新规则可以表示如下： $W_{new} = W_{previous} + \Delta W^k{}_{ij}$ 过使用梯度计算，得出更新数值

$\Delta W_{ij}^k = \alpha(-\frac{\partial E}{\partial W})$ ，其中α是所谓的学习率较小正数。

反向计算梯度

例如下图所示，对每一层的误差计算梯度



在这个示例中，我们使用平方误差的变体：误差即他们的平方差E=(d-y)^2，又称这个网络的损失函数。我们把误差项除以 2 以简化符号。反向传播算法过程的目的在于使用损失函数来最小化误差。为此，我们需要计算所有权重的偏导数。

$$\Delta W_{ij} = -\alpha \frac{\partial E}{\partial W_{ij}} = -\alpha \frac{\partial \frac{(d-y)^2}{2}}{\partial W_{ij}} \quad => \quad \Delta W_{ij} = \alpha(d-y)\frac{\partial y}{\partial W_{ij}}$$

$$E = \frac{(d-y)^2}{2}$$

最后再通过链式法则计算 $\delta_{ij} = \frac{\partial y}{\partial W_{ij}}$

我们示例中，只包含一个隐藏层，所以我们的反向传播算法过程将包含两个步骤：

第1步：计算权重向量的梯度W2(从输出到隐藏层)。 第2步：计算权重矩阵的梯度W1(从隐藏层到输入)。

第一步 (请注意，此处引用的权重向量是W2 。为了简化符号，计算过程中省略了涉及W2的所有指数。

$$y = \sum_{i}^{3}(h_i W_i)$$

$$\Rightarrow \delta_i = \frac{\partial y}{\partial W_i} = \frac{\partial \sum_i^3 (h_i W_i)}{\partial W_i} = h_i$$

根据上式：

$$\Delta W_{ij} = \alpha(d-y)\frac{\partial y}{\partial W_{ij}},$$

结合上面的推导，则：

$\Delta W_i = \alpha(d-y)h_i$ 这即是从隐层到输出层的梯度计算

$$W^2_{new} = W^2_{previous} + \Delta W^2_i$$

$$W^2_{new} = W^2_{previous} + \alpha(d-y)h_i$$

第二步

在第二步中，我们会通过计算权重矩阵W1的偏导数，更新权重矩阵W1 通过以下方式使用链式法则：

$$\delta_{ij} = \frac{\partial y}{\partial W^1_{ij}} = \sum_{j}^{N}\left(\frac{\partial y}{\partial h_j}\frac{\partial h_j}{\partial W^1_{ij}}\right)$$ 在这个示例中，我们有包含三个神经元的单个隐藏层，因此这是三

个要素的线性组合：

$$\delta_{ij} = \frac{\partial y}{\partial W_{ij}^1} = \sum_{j=1}^{3}(\frac{\partial y}{\partial h_j}\frac{\partial h_j}{\partial W_{ij}^1})$$

对于前者导数有如下：

$$\frac{\partial y}{\partial h_j} = \frac{\partial \sum_{i=1}^{3}(h_i W_i^2)}{\partial h_j} = W_j^2$$

为计算后者：

$$h_j = \Phi(\sum_{i=1}^{2}(x_i W_{ij}^1))$$

则：

$$\frac{\partial h_j}{\partial W_{ij}^1} = \frac{\partial \Phi(\sum_{i=1}^{2}(x_i W_{ij}^1))}{\partial W_{ij}^1}$$

由于激活是一个线性组合的激活函数(Φ)，它的偏导数按照以下方式计算：

$$\frac{\partial h_j}{\partial W_{ij}^1} = \frac{\partial \Phi(\sum_{i=1}^{2}(x_i W_{ij}^1))}{\partial W_{ij}^1} = \frac{\partial \Phi(\sum_{i=1}^{2}(x_i W_{ij}^1))}{\partial(\sum_{i=1}^{2}(x_i W_{ij}^1))}\frac{\partial(\sum_{i=1}^{2}(x_i W_{ij}^1))}{\partial W_{ij}^1}$$

考虑到存在各种激活函数，我们将使用常用符号保留偏导数Φ。根据我们选择使用的激活函数，每个神经元 j 都有自己的数值 ，即左边的式子保留：

$$\frac{\partial \Phi(\sum_{i=1}^{2}(x_i W_{ij}^1))}{\partial(\sum_{i=1}^{2}(x_i W_{ij}^1))} = \Phi_j'$$

而右边的式子为

$$\frac{\partial(\sum_{i=1}^{2}(x_i W_{ij}^1))}{\partial W_{ij}^1} = x_i$$

即 $$\frac{\partial h_j}{\partial W_{ij}^1} = \Phi_j' x_i$$

上面的式子相乘：

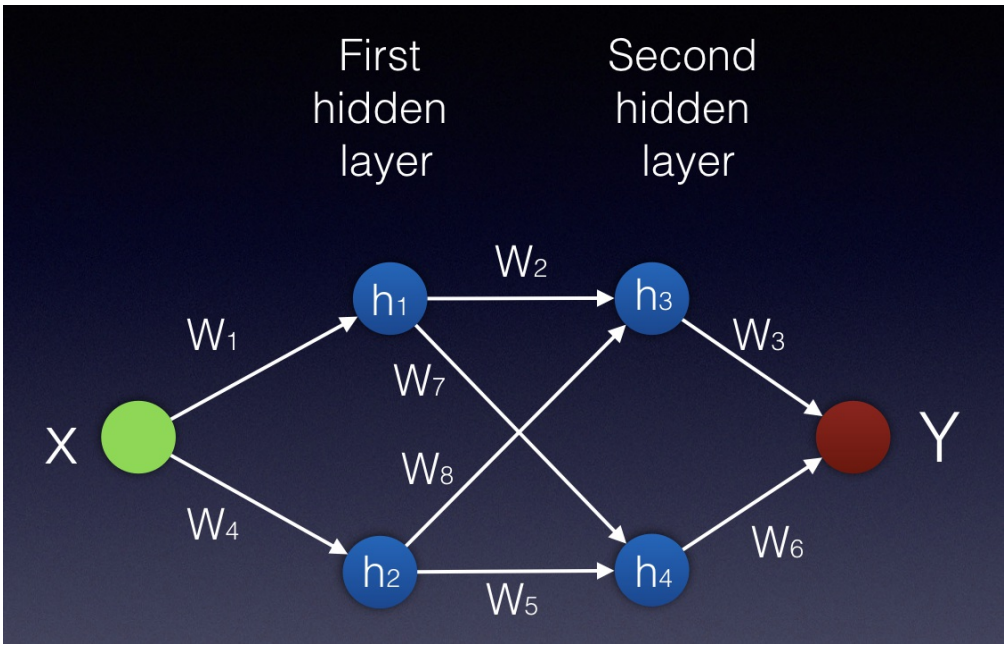
$$\delta_{ij} = \frac{\partial y}{\partial W_{ij}^1} = \sum_{j=1}^{3} \frac{\partial y}{\partial h_j} \frac{\partial h_j}{\partial W_{ij}^1} = W_j^2 \Phi_j' x_i$$

得到第二步的结果：

$$\Delta W_{ij}^1 = \alpha(d-y) W_j^2 \Phi_j' x_i$$

更新权重矩阵后，我们再次从前馈传导开始，从头开始更新权重的过程。不断迭代即可

例如以下例子中：y对w1权重的导数为



Equation A $$\frac{\partial y}{\partial W_1} = \frac{\partial y}{\partial h_3} \frac{\partial h_3}{\partial h_1} \frac{\partial h_1}{\partial W_1} + \frac{\partial y}{\partial h_4} \frac{\partial h_4}{\partial h_1} \frac{\partial h_1}{\partial W_1}$$