从零开始的深度学习课程

I 基础原理篇

谢晋璟

Commerce Data Science Team

CDL大数据分析社区
数据科学工作室
Technique Tea Party

2016-07-15

引子


年轻人，听说你渴望力量？
Complex Analysis
Locally Convex Spaces
welcome!

目录

1. 背景和大纲
2. ML和数学的复习
   - Machine Learning超简单的简介
   - 求导的复习
   - 梯度和张量，Jacobian和Hessian
3. 反向传播算法
   - 神经网络概念
   - 一个数据点上的BP
   - Batched BP
4. 具体的Layer：Affine和ReLU层
   - Affine和ReLU层定义
   - Affine和ReLU层的Jacobian
   - Affine和ReLU层的BP
5. 卷积神经网络
   - 卷积运算
   - 卷积层BP
   - padding和stride
   - Pooling层
6. Loss层的梯度

课程背景

背景

针对完全没有机器学习基础，或是使用过机器学习的library，但希望更进一步了解的工程师。

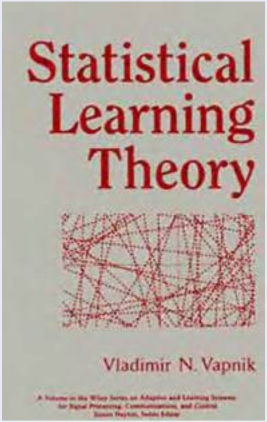
大纲

从零开始的《入门篇》包括：

- 基础原理篇
- 工具篇
- 应用篇

基础原理篇

Not This



But ...

原理篇的内容

原理篇里我们讲述的不是指类似上面的讲述为什么它能工作的原理。而是具体的How to do it.

我们会遇到下面的内容

- 常见的Machine Learning的普遍形式。
- Loss Function概念，各种loss function
- 求导，复合函数求导，向量函数求导（求梯度，Jacobian），张量的计算
- Neuron network作为复合的向量函数
- Backpropogation算法，一般形式和Neuron network下推导
- 具体例子：Affine层，ReLU层，卷积层，Pooling层

不解释了！上车！

目录

1. 背景和大纲
2. ML和数学的复习
   - Machine Learning超简单的简介
   - 求导的复习
   - 梯度和张量，Jacobian和Hessian
3. 反向传播算法
   - 神经网络概念
   - 一个数据点上的BP
   - Batched BP
4. 具体的Layer：Affine和ReLU层
   - Affine和ReLU层定义
   - Affine和ReLU层的Jacobian
   - Affine和ReLU层的BP
5. 卷积神经网络
   - 卷积运算
   - 卷积层BP
   - padding和stride
   - Pooling层
6. Loss层的梯度

ML的最常见形式

市面上最常见最简单的ML系统的输出都可以看作是如下的东西:

$$f : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{S}$$

这里:

- $\mathcal{X}$ 是feature空间，代表可以观测到的一些信号。
- $\mathcal{S}$ 是score空间，代表你期望得到的预测值。这里的score不一定要是最终的输出结果。
- f 就是prediction function，（ML里术语也叫hypotheses）

ML系统的中training的目的，就是从一个很大的预测函数集合$\mathcal{H}$（一般这个$\mathcal{H}$被称为hypotheses set）中找到一个f，使得它满足一定的要求。

Lost Function

什么样的f才是我们想要的？

我们需要一个评价标准，一般称为损失函数L，损失越小的f就越好。

常见的L都是point level的

即对于每一条数据点(x_i, y_i)，计算一个实数$L(X, f(X), Y)$

$$L : \mathcal{X} \times \mathcal{S} \times \mathcal{Y} \to \mathbb{R}$$

这里L依赖于输入数据里有一个“教导”信号Y（告诉你正确的应该如何做–类似喋喋不休的人生导师:)），这类L诱导的方法被称为supervised Learning。

如果数据没有告诉你正确的如何做，只告诉你做对或做错，这种一般归类于Reinforcement learning。本课程里不涉及。

如果数据没有Y

我们必须选择不依赖于Y的L,这类L就诱导了所谓的unsupervised learning.

需要注意的是：我们这里假设L都是point level的

而对$\boldsymbol{f}$好坏的整体评估，一般使用平均损失

$$\mathrm{E}[L(X, \boldsymbol{f}(X), Y)]$$

在实际应用中，E通常用经验平均代替：

$$\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} L(x_i, \boldsymbol{f}(x_i), y_i)$$

这里N是用于评估的数据集的个数。如果评估的数据集是用了训练数据，上面的估计就叫做E_{in}（in sample error）；评估数据集是测试数据，上面的估计就叫做E_{out}（out of sample error）。

Lost Function例子

- 平方误差：
$$L(x, y_{\text{pred}}, y) = (y - y_{\text{pred}})^2$$
这里的score空间和最终的输出结果空间$\mathcal{Y}$是一致的
- 0/1-Logistic的极大似然:
$$L(x, s, y) = -\log(\varphi(s)^y \cdot (1 - \varphi(s))^{1-y})$$
这里score空间是$\mathbb{R}$，output空间$\mathcal{Y} = \{0, 1\}$的。
注：$\varphi(s) = \frac{1}{1+e^{-s}}$
- ±1-Logistic的极大似然:
$$L(x, s, y) = -\log(\varphi(y \cdot s))$$
这里score空间还是$\mathbb{R}$，但$\mathcal{Y} = \{-1, 1\}$的，所以公式化简了。

Lost Function例子

- Cross-Entropy loss(softmax的极大似然)

$$L(x,s,y) = -s_y + \log(\sum_{i=1}^{m} e^{s_i})$$

这里score是个$\mathbb{R}^m$向量，而$y \in \mathcal{Y} = \{1,2,\ldots,m\}$。

- SVM loss

$$L(x,s,y) = \sum_{i \neq y} (s_i - s_y + 1)_+$$

当正确的类y的score：s_y比其他类score：s_i都大上至少一个margin（这里是1）时才不产生loss。

如何求f?

最优化的思想

为了能使用数学求解，我们需要hypotheses的集合$\mathcal{H}$能够被参数化。这种参数化了的空间里的成员一般可以记作$f(X;\theta)$形状，参数空间在没有其他约束的情况下就是向量空间$\theta \in \mathbb{R}^n$。
而我们的目标：寻找一个f，就转换成下面的数学问题，

$$\min_{\theta} \mathrm{E}[L(X, f(X;\theta), Y)]$$

如果把后面的一堆东西看做一个关于θ的函数：

$$g(\theta) = \mathrm{E}[L(X, f(X;\theta), Y)]$$

这就是一个求函数最小值的问题。

目录

1. 背景和大纲
2. ML和数学的复习
   - Machine Learning超简单的简介
   - 求导的复习
   - 梯度和张量，Jacobian和Hessian
3. 反向传播算法
   - 神经网络概念
   - 一个数据点上的BP
   - Batched BP
4. 具体的Layer：Affine和ReLU层
   - Affine和ReLU层定义
   - Affine和ReLU层的Jacobian
   - Affine和ReLU层的BP
5. 卷积神经网络
   - 卷积运算
   - 卷积层BP
   - padding和stride
   - Pooling层
6. Loss层的梯度

函数极值如何求？

答案

求导

复习

传说中挂了很多人高数告诉我们，一元函数$g(x)$如果可以求导，那么它的极值点的导数等于0.
所以求出导数等于0的点，就是可能的最小值点。
比如$x^2 + ax + b$ 在$2x + a = 0$ 即$x = -a/2$ 处取到极值。
对于多元函数，极值点的必要条件是：每个方向的偏导都等于0：

$$\frac{\partial g(x_1, x_2, \ldots, x_i, \ldots, x_n)}{\partial x_i} = 0,\, i = 1, \ldots, n$$

closed form

如果求解上面的方程组很容易，或有公式解，那么问题到此就可以解决了

optimization algorithm

大部分情况没有公式解。就需要使用优化算法。但为什么要自己求导？很多优化算法不是只要一个目标函数么？

因为这样速度快啊！

复合函数求导

链式法则

$$\frac{d}{dx}f(g(x)) = f'(g(x)) \cdot g'(x)$$

多元函数情况

令$f(z_1, z_2, \cdots, z_k)$为多元函数，$g_i(x)$, $i = 1, \ldots, k$为一组函数。

$$\frac{d}{dx}f(g_1(x), g_2(x), \cdots, g_k(x)) = \frac{\partial f}{\partial z_1}g_1'(x) + \cdots + \frac{\partial f}{\partial z_k}g_k'(x)$$

目录

1 背景和大纲
2 ML和数学的复习
- Machine Learning超简单的简介
- 求导的复习
- 梯度和张量，Jacobian和Hessian

3 反向传播算法
- 神经网络概念
- 一个数据点上的BP
- Batched BP

4 具体的Layer：Affine和ReLU层
- Affine和ReLU层定义
- Affine和ReLU层的Jacobian
- Affine和ReLU层的BP

5 卷积神经网络
- 卷积运算
- 卷积层BP
- padding和stride
- Pooling层

6 Loss层的梯度

梯度和Jacobian

现实情况中，参数空间基本上不可能是一维的，对目标函数g，所有方向偏导形成一个向量而非一个数：

Gradient

$$\nabla_\theta g = \begin{pmatrix} \frac{\partial g}{\partial \theta_1} & \frac{\partial g}{\partial \theta_2} & \cdots & \frac{\partial g}{\partial \theta_n} \end{pmatrix}$$

所以一个标量（0-阶张量）通过求梯度变成了一个向量（1-阶张量）。如果原来的$\boldsymbol{g}$是向量映射$\boldsymbol{g} = (g_1, g_2, \ldots, g_m)$，求导就得到Jacobian矩阵。

Jacobian

$$\frac{\partial \boldsymbol{g}}{\partial X} = \begin{pmatrix} \frac{\partial g_1}{\partial X_1} & \frac{\partial g_1}{\partial X_2} & \cdots & \frac{\partial g_1}{\partial X_n} \\ \frac{\partial g_2}{\partial X_1} & \frac{\partial g_2}{\partial X_2} & \cdots & \frac{\partial g_2}{\partial X_n} \\ & \vdots & & \\ \frac{\partial g_m}{\partial X_1} & \frac{\partial g_m}{\partial X_2} & \cdots & \frac{\partial g_m}{\partial X_n} \end{pmatrix}$$

所以一个向量（1-阶张量）通过求导变成了一个矩阵（2-阶张量）。从这两个例子知道，求导算子会提升张量的阶。

Hessian–二阶张量

如果要计算的$\boldsymbol{g}$是某个函数的梯度：$\boldsymbol{g} = \nabla g = (\frac{\partial g}{\partial X_1}, \dots, \frac{\partial g}{\partial X_n})$，它的Jacobian就是原来$g$的Hessian（二阶导数）

Hessian

$$\boldsymbol{H}(g) = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 g}{\partial X_1^2} & \frac{\partial^2 g}{\partial X_1 \partial X_2} & \cdots & \frac{\partial^2 g}{\partial X_1 \partial X_n} \\ \frac{\partial^2 g}{\partial X_2 \partial X_1} & \frac{\partial^2 g}{\partial X_2^2} & \cdots & \frac{\partial^2 g}{\partial X_2 \partial X_n} \\ & \vdots & & \\ \frac{\partial^2 g}{\partial X_n \partial X_1} & \frac{\partial^2 g}{\partial X_n \partial X_2} & \cdots & \frac{\partial^2 g}{\partial X_n^2} \end{pmatrix}$$

所以多元标量函数求高阶导，会产生高阶的张量。

题外话

曾经有大师说过

“这世界上没有什么不能通过求导解决的，如果有，那就再求一次。。。”

运筹学中的优化算法大部分也都用到了二阶导的信息，用到了Hessian。然而

Hessian存储和计算（包括产生和求逆）都耗费大量内存和计算资源，在大规模的神经网络计算中并没有使用，而是用一些拟二阶方法代替（用很容易得到的矩阵，比如对角阵去近似Hessian）。

高于二阶的导数在实际应用的优化算法中出现是非常少见的。

链式法则的向量（张量）情况

考虑这样的函数：

$$l(x) = f \circ \boldsymbol{g} \circ \boldsymbol{h}(x) = f\left(g_1(h_1(x), \cdots, h_k(x)), \ldots, g_n(h_1(x), \cdots, h_k(x))\right)$$

运用链式法则

$$l'(x) = \sum_i \frac{\partial f}{\partial g_i} \sum_j \frac{\partial g_i}{\partial h_j} h'_j(x) = \sum_{i,j} \frac{\partial f}{\partial g_i} \frac{\partial g_i}{\partial h_j} h'_j(x)$$

可以看作是三个矩阵相乘

$$\nabla_{\boldsymbol{g}} f \cdot \left[\frac{\partial \boldsymbol{g}}{\partial \boldsymbol{h}}\right]_{ij} \cdot \boldsymbol{h}'$$

这里$\left[\frac{\partial \boldsymbol{g}}{\partial \boldsymbol{h}}\right]_{ij}$就是一个二阶张量（$\boldsymbol{g}$的Jacobian矩阵）

目录

1. 背景和大纲
2. ML和数学的复习
   - Machine Learning超简单的简介
   - 求导的复习
   - 梯度和张量，Jacobian和Hessian
3. 反向传播算法
   - 神经网络概念
   - 一个数据点上的BP
   - Batched BP
4. 具体的Layer：Affine和ReLU层
   - Affine和ReLU层定义
   - Affine和ReLU层的Jacobian
   - Affine和ReLU层的BP
5. 卷积神经网络
   - 卷积运算
   - 卷积层BP
   - padding和stride
   - Pooling层
6. Loss层的梯度

例子：两层神经网络

抛开那些神经网络的图示啊，动力学特性啊，它的结构异常简单，就是多个向量多元函数的复合。

两层网络

第一层输入是X，输出是隐层Z

$$Z = (f_1(X; W_1), \ldots, f_h(X; W_1))$$

第二层输入是Z，输出是score向量S

$$S = (g_1(Z; W_2), \ldots, g_t(Z; W_2))$$

这里$\boldsymbol{f}$和$\boldsymbol{g}$都是向量函数，他们的复合就是我们一开始说的prediction function。不同的参数取值W_1, W_2给出了不同的hypotheses，训练的过程就是找到一个使得$L(S, y)$ 在全局上最优的过程。

注：这里L不依赖于X，所以我们省略X。

神经网络就像乐高积木

每一层的向量映射f^i就如同乐高里的小积木，函数复合就是“拼”积木，不同的拼装方式得到不同的hypotheses。

在文献和代码里，这些f常常被组织成层（Layer）。最简单的情况，一个f就是一个Layer。也可以两个f复合起来当作一个Layer。这和写代码的喜好有关，不影响实质。

功能层面

任何神经网络结构都有至少需要两个功能：预测和更新权值。

预测

给定一个输入数据，计算一个score（某种预测结果）

而训练的目的是通过计算Lost Function（例如，前面提到的softmax）得到的损失值$l = L(S, y)$来不断修正我们的hypotheses。

更新权值

将损失信号l正确地反映为自身参数的修正量

由于预测时，数据是一层一层从下到上流动，称为向前过程。而反馈信号是从上到下一层层返回来，称为向后过程。

Forward/Backward

向前 数据一层层的被该层的$\boldsymbol{f}^i$作用，传到下一层

向后 从Loss算出的反馈信号一层层的通过$\boldsymbol{f}^i$的Jacobian传回上一层

目录

1 背景和大纲

2 ML和数学的复习
- Machine Learning超简单的简介
- 求导的复习
- 梯度和张量，Jacobian和Hessian

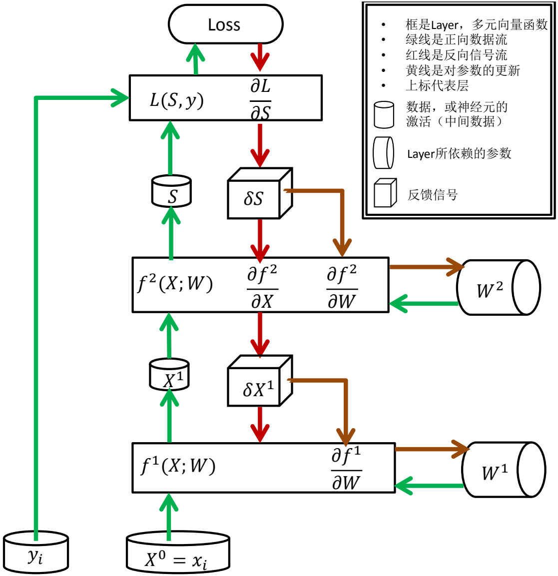
3 反向传播算法
- 神经网络概念
- 一个数据点上的BP
- Batched BP

4 具体的Layer：Affine和ReLU层
- Affine和ReLU层定义
- Affine和ReLU层的Jacobian
- Affine和ReLU层的BP

5 卷积神经网络
- 卷积运算
- 卷积层BP
- padding和stride
- Pooling层

6 Loss层的梯度

Looking from 30000 inch height



- 框是Layer，多元向量函数
- 绿线是正向数据流
- 红线是反向信号流
- 黄线是对参数的更新
- 上标代表层

数据，或神经元的激活（中间数据）

Layer所依赖的参数

反馈信号

前向传播信号流

我们约定上标代表层而非指数，从一个输入数据计算loss过程如下：

输入 $X^0 = x$，这里$(x, y) \in \mathcal{D}$是一个数据点

Forward $X^i = \boldsymbol{f}^i(X^{i-1}; W^i)$，每个$X^i$可以想象成$i$层神经元的激活，参数$W^i$决定的$\boldsymbol{f}^i(\cdot, W^i)$是第$i-1$层神经元的激活信号到第$i$层神经元的传播通路。
用h_i记该层的神经元个数，那么$\boldsymbol{f}^i$是一个多元向量映射

$$\boldsymbol{f}^i : \mathbb{R}^{h_{i-1}} \to \mathbb{R}^{h_i}$$

Score 用q记总的层数，最后一层输出就是score，记为

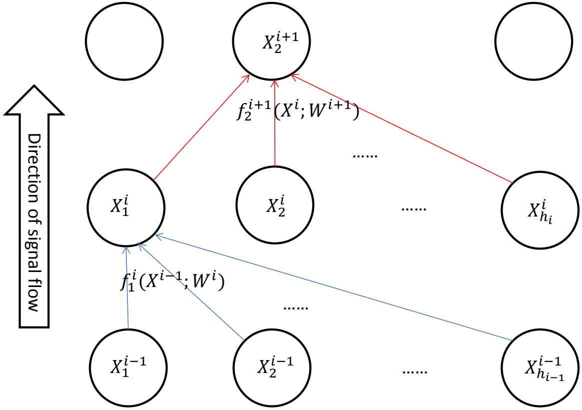
$$S = X^q = \text{Net}(x; W)$$

这里$W = \{W^1, W^2, \ldots, W^q\}$是该网络Net的全体参数

Loss 这个数据点(x, y)的训练损失就是

$$l(\text{Net}(x), y) = L(S, y)$$

feed forward



后(反)向传播信号流

定义第i层上反馈信号

$$\delta X^i = (\frac{\partial l}{\partial X^i_1}, \frac{\partial l}{\partial X^i_2}, \dots, \frac{\partial l}{\partial X^i_{h_i}})$$

那么反馈信号的流动是：

输入 $\delta l = (\frac{\partial l}{\partial s_1}, \frac{\partial l}{\partial s_2}, \dots, \frac{\partial l}{\partial s_{h_q}}) = \delta X^q$

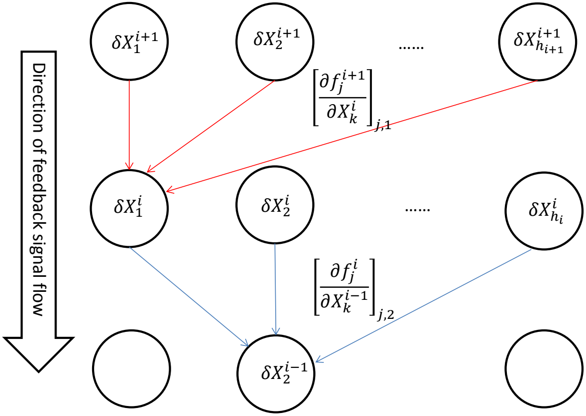
后向传播 $\delta X^i = \delta X^{i+1} \cdot \frac{\partial X^{i+1}}{\partial X^i}$，这里

$$\frac{\partial X^{i+1}}{\partial X^i} = \left[\frac{\partial f^{i+1}_j}{\partial X^i_k}\right]_{jk}$$

是f^{i+1}对X^i的Jacobian矩阵。

美妙的是，只要Jacobian算好，那么向后传播就是个矩阵乘法而已。

backpropogation



后(反)向传播信号流

我们最终的目的是得到所有层的参数W^i的修正量$\mathrm{d}\, W^i$（下面也叫做l对W^i的反馈）。
对$\frac{\partial l}{\partial W^i}$，利用链式法则，我们有

$$\frac{\partial l}{\partial W^i} = \frac{\partial l}{\partial X^i} \cdot \frac{\partial X^i}{\partial W^i} = \delta X^i \cdot \left[\frac{\partial f^i_j}{\partial W^i_k}\right]_{jk}$$

其中

$$\left[\frac{\partial f^i_j}{\partial W^i_k}\right]_{jk}$$

是$\boldsymbol{f}^i$对W^i的Jacobian矩阵。

后(反)向传播中对参数的update

最简单的参数更新

$$W^i \leftarrow W^i - \lambda \cdot \nabla_{W^i} l = W^i - \lambda \cdot \delta X^i \cdot \left[\frac{\partial f^i_j}{\partial W^i_k}\right]_{jk}$$

λ是learning rate，代表每次更新的步长。后面的$\delta X^i \cdot \left[\frac{\partial f^i_j}{\partial W^i_k}\right]_{jk}$就是这里的$\mathrm{d}W$.

我们需要两部分

local gradient部分

$$\left[\frac{\partial f^i_j}{\partial W^i_k}\right]_{jk}$$

一般只需要前向时的X^{i-1}, X^i就可以算出的

反馈部分

$$\delta X^i$$

由更高的层后向传播而来

目录

1 背景和大纲

2 ML和数学的复习
- Machine Learning超简单的简介
- 求导的复习
- 梯度和张量，Jacobian和Hessian

3 反向传播算法
- 神经网络概念
- 一个数据点上的BP
- Batched BP

4 具体的Layer：Affine和ReLU层
- Affine和ReLU层定义
- Affine和ReLU层的Jacobian
- Affine和ReLU层的BP

5 卷积神经网络
- 卷积运算
- 卷积层BP
- padding和stride
- Pooling层

6 Loss层的梯度

然而

事情并没有那么简单

我们不是每次只考虑一个数据点的

Batched Update的概念

回忆：经验平均损失

$$\mathrm{E}_{\text{empirical}}[L(X, \boldsymbol{f}(X), Y)] = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} L(x_i, \boldsymbol{f}(x_i), y_i)$$

batched update

每做一次update，就要遍历一遍数据的方式称为batched update。

这种方法缺点是收敛很慢。

stochastic gradient descent

另一个极端是每看一条数据，就计算这个数据的loss，update相应的参数

它的缺点是数据的variation很大，训练过程中参数振荡地厉害。

Mini-Batch

Mini Batch

一个折衷的办法就是每次sample出B条数据，在它上面计算经验损失；然后就Update。B是一个事先选定的参数。

设当前Mini-Batch的数据是$(x_i, y_i), i = 1, \ldots, B$，那么这个Mini-Batch上目标函数变成

Objective function

$$\text{Obj} = \frac{1}{B}\sum_{i=1}^{B} l(\text{Net}(x_i), y_i)$$

下面推导这种情况下反向传播的形式

Mini-Batch Update Rule

Mini Batch Update Rule

$$W^i \leftarrow W^i - \lambda \cdot \frac{\partial \text{Obj}}{\partial W^i}$$

where

$$\frac{\partial \text{Obj}}{\partial W^i} = \frac{1}{B} \sum_{j=1}^{B} \frac{\partial l^j}{\partial W^i}$$

where

$$l^j = l(\text{Net}(x_j; W), y_j)$$

Tensor Version

Batch version Tensor: $\delta X_k^{i,j}$

每层上的X^i现在是个二阶的张量，上标分别代表层和第几个样本，下标是feature（神经元）编号

$$X_k^{i,j},\ j = 1 \dots B; k = 1 \dots h_i$$

更高的层传至该层的反馈由定义可知：

$$\delta X_k^{i,j} = \frac{\partial \text{Obj}}{\partial X_k^{i,j}} = \frac{\partial}{\partial X_k^{i,j}} \left[\frac{1}{B} \sum_m l^m \right] = \frac{1}{B} \cdot \frac{\partial l^j}{\partial X_k^{i,j}},\ i = 1 \dots q$$

Chain Rule in Tensor Form

$$
\begin{aligned}
\delta X_k^{i,j} &= \frac{1}{B} \cdot \frac{\partial l^j}{\partial X_k^{i,j}} = \frac{1}{B} \sum_{u,v} \frac{\partial l^j}{\partial X_v^{i+1,u}} \cdot \frac{\partial X_v^{i+1,u}}{\partial X_k^{i,j}} \\
&= \frac{1}{B} \sum_{v} \frac{\partial l^j}{\partial X_v^{i+1,j}} \cdot \frac{\partial X_v^{i+1,j}}{\partial X_k^{i,j}} = \frac{1}{B} \sum_{v} (B \cdot \delta X_v^{i+1,j}) \cdot \frac{\partial X_v^{i+1,j}}{\partial X_k^{i,j}} \\
&= \sum_{v} \frac{\partial X_v^{i+1,j}}{\partial X_k^{i,j}} \cdot \delta X_v^{i+1,j}
\end{aligned}
$$

用$x^{i,j}$代表数据x_j在forward过程中传到第i层时的值，它是个$\mathbb{R}^{h_i}$中的向量。

Shared Jacobian

By definition,

$$\frac{\partial X_v^{i+1,j}}{\partial X_k^{i,j}} = \frac{\partial f_v^{i+1}(x^{i,j})}{\partial X_k^{i,j}}$$

而记$\mathrm{J}_X(\boldsymbol{f}^{i+1})(x)$为$\boldsymbol{f}^{i+1}$对$X$的Jacobian在向量$x$上的取值，那么上式用矩阵形式写出就是：

$$\left[\frac{\partial X_v^{i+1,j}}{\partial X_k^{i,j}}\right]_{vk} = \mathrm{J}_X(\boldsymbol{f}^{i+1})(x^{i,j})$$

所以Chain Rule化简为

$$\delta X^{i,j} = \delta X^{i+1,j} \cdot \mathrm{J}_X(\boldsymbol{f}^{i+1})(x^{i,j}) \;\;,\;\; j = 1 \ldots B$$

这里$\mathrm{J}_X(\boldsymbol{f}^{i+1})$如果有解析形式，那么只要对每个数据点$x^{i,j}$代入计算即可。

Batched Forward/Backward/Update

用$\mathrm{J}^{i,j}_{v,k}$记$\mathrm{J}_X(\boldsymbol{f}^i)(x^{i-1,j})_{v,k}$，前向，后向和update rule就是：

Tensor Form Forward and Backward

前向：

$$X^{i,j}_k = f^i_k(X^{i-1,j})$$

后向：

$$\delta X^{i,j}_k = \sum_v \delta X^{i+1,j}_v \ \mathrm{J}^{i+1,j}_{v,k}$$

Tensor Form Update Rule

$$\frac{\partial \mathrm{Obj}}{\partial W^i} = \frac{1}{B}\sum_j \frac{\partial l^j}{\partial W^i} = \frac{1}{B}\sum_{j,k} \frac{\partial l^j}{\partial X^{i,j}_k}\frac{\partial X^{i,j}_k}{\partial W^i}$$

$$= \sum_{j,k} \delta X^{i,j}_k \cdot \nabla_{W^i}(\boldsymbol{f}^i_k)(x^{i-1,j})$$

看到这里，大家有没有觉得

看到这里，大家有没有觉得

然而

看到这里，大家有没有觉得

然而

革命尚未成功

看到这里，大家有没有觉得

然而

革命尚未成功

同志仍需努力

What's next?

从一般

我们无法进一步化简，因为这里假设的$\boldsymbol{f}^i$和W^i都是一般的形状，没有特殊的形式。

然而！

到特殊

在神经网络，或是深度学习里，$\boldsymbol{f}^i$和W^i都有一定的形状和性质，无论是从编写代码上，还是实际的计算里，可以达到很高的效率。
我们下面就开始讨论具体的$\boldsymbol{f}$。

目录

1 背景和大纲
2 ML和数学的复习
- Machine Learning超简单的简介
- 求导的复习
- 梯度和张量，Jacobian和Hessian

3 反向传播算法
- 神经网络概念
- 一个数据点上的BP
- Batched BP

4 具体的Layer：Affine和ReLU层
- Affine和ReLU层定义
- Affine和ReLU层的Jacobian
- Affine和ReLU层的BP

5 卷积神经网络
- 卷积运算
- 卷积层BP
- padding和stride
- Pooling层

6 Loss层的梯度

Affine Transform (Layer)

Affine Transform

令W为$h_i \times h_{i-1}$矩阵，b为$\mathbb{R}^{h_i}$向量，那么下式

$$Y = W \cdot X + b$$

就定义了$\mathbb{R}^{h_{i-1}} \to \mathbb{R}^{h_i}$映射。（称为仿射变换）对应于我们以前的定义

$$f_k = W(k,:) \cdot X + b_k$$

原来定义中的W^i就是

$$[\mathrm{vec}(W), b]$$

这里vec是把一个矩阵，或是张量平坦化成一个向量的算子。

Affine Transform由参数W, b唯一决定。平坦化相当于忘记了它们的形状（上一节做法）。然而这里W有矩阵形状，我们要推导保持这个形状下的公式。用W^i_{kj}, b^i_k张量来记这两组参数。

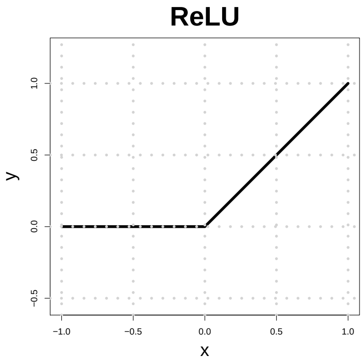
Rectifier Linear Unit

ReLU是一个不依赖于参数的映射：

ReLU

$$Y_k = (X_k)_+ = \max(0, X_k),\ \ k = 1, \ldots, h_i$$

就是每个分量做截断：小于零的令它为0，正部不变。



Affine ReLU Layer

一个ReLU复合上一个Affine就构成了neuron network中最常见，也是最简单的非线性，可训练的Layer。

前向

$$Y_k = (W(k,:) \cdot X^{i-1})_+, \; k = 1, \ldots, h_i$$

复合函数的Jacobian由链式法则推导，下面分别讨论之。

首先，为了推导方便起见，需要引入如下记号：

Kronecker delta记号

$$\delta_{mn} = \begin{cases} 1 & m = n \\ 0 & m \neq n \end{cases}$$

目录

1 背景和大纲
2 ML和数学的复习
- Machine Learning超简单的简介
- 求导的复习
- 梯度和张量，Jacobian和Hessian

3 反向传播算法
- 神经网络概念
- 一个数据点上的BP
- Batched BP

4 具体的Layer：Affine和ReLU层
- Affine和ReLU层定义
- Affine和ReLU层的Jacobian
- Affine和ReLU层的BP

5 卷积神经网络
- 卷积运算
- 卷积层BP
- padding和stride
- Pooling层

6 Loss层的梯度

Jacobian of Affine mapping

回忆：$Y = WX + b$

Jacobian w.r.t. X

$$\frac{\partial Y_k}{\partial X_j} = W(k, j)$$

这里b不出现在对X的Jacobian的计算中

$$\mathrm{J}_X(\text{Affine}, W) = W$$

然而$W(u, v)$有了形状，Y对W的“导数”就写不成矩阵了，它是一个3-阶张量。对b仍然可以写成Jacobian矩阵。

Differential w.r.t. W, b

$$\frac{\partial Y_k}{\partial W(u, v)} = \delta_{ku} \cdot X_v$$

$$\frac{\partial Y_k}{\partial b_u} = \delta_{ku}$$

Jacobian of ReLU

回忆：$Y_k = \max(0, X_k)$

相信聪明的你已经注意到了

它在0点不可导！

然而，除去0点外，ReLU是光滑从而可以求任意阶导的。0点导数没有定义，但对我们实际使用没有影响，ReLU只是在一个测度为0的集合上不可导而已。

Jacobian w.r.t. X

$$\frac{\partial Y_k}{\partial X_v} = \delta_{kv} \cdot 1_{X_v > 0}$$

这里$1_{X_v > 0}$是示性函数，它在条件为真时取1，其他时候取0。

目录

1 背景和大纲

2 ML和数学的复习
- Machine Learning超简单的简介
- 求导的复习
- 梯度和张量，Jacobian和Hessian

3 反向传播算法
- 神经网络概念
- 一个数据点上的BP
- Batched BP

4 具体的Layer：Affine和ReLU层
- Affine和ReLU层定义
- Affine和ReLU层的Jacobian
- Affine和ReLU层的BP

5 卷积神经网络
- 卷积运算
- 卷积层BP
- padding和stride
- Pooling层

6 Loss层的梯度

Backpropogation on ReLU

ReLU比较简单，先看它。
ReLU不带参数，只负责将δX向更低的层传递

ReLU's backward

$$\delta X_k^{i,j} = \sum_v \delta_{k,v} \cdot 1_{X_v^{i,j}>0} \cdot \delta X_v^{i+1,j} = 1_{X_k^{i,j}>0} \cdot \delta X_k^{i+1,j}$$

物理意义解释

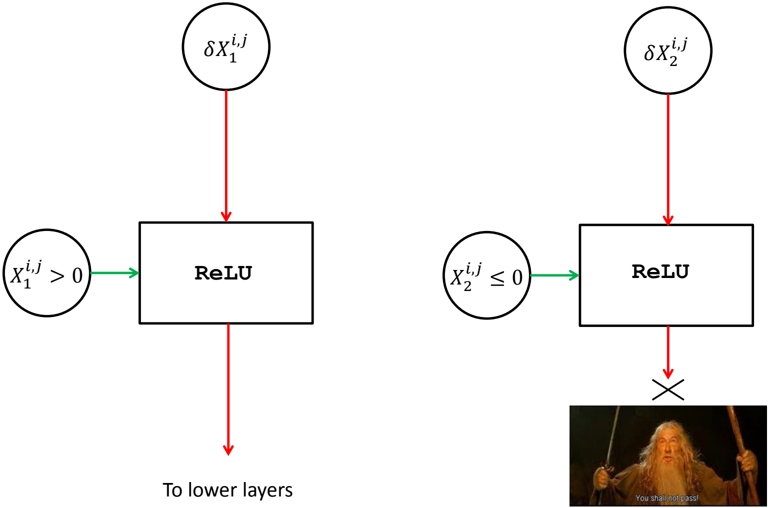
非常直观：

如果当前的i层的第k个神经元对第j组数据是激活的$X_k^{i,j} > 0$，那么就导通。让上层的反馈信号$\delta X_k^{i+1,j}$通过。

不然，反馈信号就被截断于此。

ReLU backward flow

注意反向不再是ReLU函数了，它是由$X_k^{i,j}$控制的，输出是$\delta X_k^{i+1,j}$或0.



Backpropogation on Affine Layer

Affine Layer一方面负责将δX向更低的层传递；一方面还要计算反馈给自己参数W, b的梯度$\mathrm{d}\,W, \mathrm{d}\,b$。

Affine Layer backward

$$\delta X_k^{i-1,j} = \sum_v W^i(v,k)\delta X_v^{i,j}$$

这是可以写成矩阵形式的：

$$\delta X^{i-1,j} = \delta X^{i,j} \cdot W^i$$

物理意义也非常直观：

正向是

$$X^{i,j} = W^i \cdot X^{i-1,j} + b^i$$

反向是转置（如果我们把δX^i变成列向量）

$$(\delta X^{i-1,j})^T = (W^i)^T \cdot (\delta X^{i,j})^T$$

Update rule on Affine Layer

Affine Layer update rule on W

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial \text{Obj}}{\partial W^i(u,v)} &= \sum_{j,k} \frac{\partial \text{Obj}}{\partial X_k^{i,j}} \frac{\partial X_k^{i,j}}{\partial W^i(u,v)} \\
&= \sum_{j,k} \delta X_k^{i,j} \cdot (\delta_{k,u} \cdot X_v^{i-1,j}) \\
&= \sum_{j} \delta X_u^{i,j} \cdot X_v^{i-1,j}
\end{aligned}
$$

物理意义

将反馈信号δX^i按照当前层输入的激活度X^{i-1}的比例传到该Layer的参数W^i上。

我们下面试着把它写成矩阵形式得到更直观感受。
一般地，我们习惯上把数据写成矩阵时，每一行是一条记录。不同的列代表不同的feature，不同的行代表不同的数据样本。所以可以写成如下的形式。

数据矩阵排列约定和update rule矩阵形式

δX^i写成矩阵

$$\delta X^i = \begin{pmatrix} \delta X_1^{i,1} & \cdots & \delta X_{h_i}^{i,1} \\ \delta X_1^{i,2} & \cdots & \delta X_{h_i}^{i,2} \\ \vdots & & \vdots \\ \delta X_1^{i,B} & \cdots & \delta X_{h_i}^{i,B} \end{pmatrix}$$

X^{i-1}写成矩阵

$$X^{i-1} = \begin{pmatrix} X_1^{i-1,1} & \cdots & X_{h_{i-1}}^{i-1,1} \\ X_1^{i-1,2} & \cdots & X_{h_{i-1}}^{i-1,2} \\ \vdots & & \vdots \\ X_1^{i-1,B} & \cdots & X_{h_{i-1}}^{i-1,B} \end{pmatrix}$$

Affine Layer update rule: derivation

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial \text{Obj}}{\partial W^i(u,v)}\right]_{u,v} &= \sum_j (\delta X^{i,j})^T \cdot X^{i-1,j} \\ &= (\delta X^i)^T \cdot X^{i-1} \end{aligned}$$

Matrix form

$$\mathrm{d}\, W = (\delta X^i)^T \cdot X^{i-1}$$

Update rule for b

不要忘了还有一部分参数在b中

$$\frac{\partial \text{Obj}}{\partial b_k^i} = \sum_{j,u} \frac{\partial \text{Obj}}{\partial X_u^{i,j}} \frac{\partial X_u^{i,j}}{\partial b_k^i} = \sum_{j,u} \delta X_u^{i,j} \cdot \delta_{k,u} = \sum_j \delta X_k^{i,j}$$

矩阵形式

$$\mathrm{d}\, b^i = (\delta X^i)^T \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}$$

或写成

矩阵形式

$$\mathrm{d}(b^i)^T = \mathbb{1}^T \cdot \delta X^i$$

Affine Layer Summary

使用记号

$$\mathbb{1} = \begin{pmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} \quad X^{i-1} = \begin{pmatrix} X_1^{i-1,1} & \dots & X_{h_{i-1}}^{i-1,1} \\ X_1^{i-1,2} & \dots & X_{h_{i-1}}^{i-1,2} \\ \vdots & & \vdots \\ X_1^{i-1,B} & \dots & X_{h_{i-1}}^{i-1,B} \end{pmatrix}$$

Forward/Backward Matrix form

$$X^i = X^{i-1} \cdot (W^i)^T + \mathbb{1} \cdot (b^i)^T$$
$$\delta X^{i-1} = \delta X^i \cdot W^i$$

Update rule for W^i, b^i

$$\mathrm{d}(W^i)^T = (X^{i-1})^T \cdot \delta X^i$$
$$\mathrm{d}(b^i)^T = \mathbb{1}^T \cdot \delta X^i$$

AffineReLU Layer Summary

使用记号

$$(X > 0) = \text{elementwise boolean matrix}$$
$$A \odot B = \text{elementwise matrix multiplication}$$

AffineReLU Forward/Backward Matrix form

$$X^i = (X^{i-1} \cdot (W^i)^T + \mathbb{1} \cdot (b^i)^T)_+$$
$$\delta X^{i-1} = (\delta X^i \odot (X^i > 0)) \cdot W^i$$

AffineReLU Update rule for W^i, b^i

$$\mathrm{d}(W^i)^T = (X^{i-1})^T \cdot (\delta X^i \odot (X^i > 0))$$
$$\mathrm{d}(b^i)^T = \mathbb{1}^T \cdot (\delta X^i \odot (X^i > 0))$$

注：ReLU的意义

这里，ReLU虽然非常简单，但是又不可或缺！么有它，再多Affine的复合还是Affine。我们的$\mathcal{H}$就是全体Affine变换而已。然而平面上的Affine就是条线，它甚至无法学习XOR这个函数。

ReLU就是星星之火点燃了无限的可能性，让$\mathcal{H}$丰满起来。

除了ReLU，我们也可以使用其他的非线性变换和Affine结合。比如

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

或ELU（Exponential Linear Units）

$$f(x) = \begin{cases} x & x > 0 \\ \alpha \cdot (e^x - 1) & x \leq 0 \end{cases}$$

或带参数w_j^k, b_j^k的maxout layer

$$f_k(X) = \max_{1\ldots t}((w_1^k)^T X + b_1^k, \ldots, (w_t^k)^T X + b_t^k)$$

目录

1. 背景和大纲
2. ML和数学的复习
   - Machine Learning超简单的简介
   - 求导的复习
   - 梯度和张量，Jacobian和Hessian
3. 反向传播算法
   - 神经网络概念
   - 一个数据点上的BP
   - Batched BP
4. 具体的Layer：Affine和ReLU层
   - Affine和ReLU层定义
   - Affine和ReLU层的Jacobian
   - Affine和ReLU层的BP
5. 卷积神经网络
   - 卷积运算
   - 卷积层BP
   - padding和stride
   - Pooling层
6. Loss层的梯度

为什么要用卷积

例子

考虑一个640×480的图像，每个像素是个输入。如果输出也是同样维度的图像，那么Affine变换需要$849347481600 \approx 85$billion个参数。

然而，有意义的部分都聚成小块，比如10×10的块，当然它可能在原来图像的某个位置上。

如果我们的映射只是对这每个每个的小块做，那么就无需上面那么庞大的参数集了。正是这种想法把卷积引入图像处理。

下面约定输入输出的记号：

一条记录上的数据x_i

上两节的一个数据点上的输入x_i都是向量。这里的x_i本身就有形状，对于有色的图像，它是三阶张量。记为$X_{u,v}^c$。而这一节中Layer的输出也是三阶张量，记为$Y_{u',v'}^{c'}$

什么是卷积？

卷积算子

数学上，卷积用于从两个函数得到一个新函数

$$(f * g)(\tau) = \int f(x)g(\tau - x)\,\mathrm{d}\,x$$

平面卷积算子

如果$A_{x,y}, B_{x,y}$是两个二阶张量，那么它们卷积我们约定为：

$$(A * B)_{u,v} = \sum_{i,j} A_{i,j} \cdot B_{u+i,v+j}$$

三维卷积算子

如果$A^c_{x,y}, B^c_{x,y}$是两个三阶张量，那么它们卷积我们约定为：

$$(A \star B)_{u,v} = \sum_{i,j,k} A^k_{i,j} \cdot B^k_{u+i,v+j}$$

图像处理用的卷积层

卷积层$\boldsymbol{f}$的基本形式

$$Y^{c'} = \boldsymbol{f}^{c'}(X) = K^{c'} \star X$$

写成分量形式：

$$Y^{c'}_{u',v'} = \boldsymbol{f}^{c'}(X)_{u',v'} = \sum_{i=-d}^{d} \sum_{j=-d}^{d} \sum_{k=1}^{n_c} K(i,j)^{c'}_k \cdot X^k_{u'+i,v'+j}$$

解释

- $\boldsymbol{f}$由一系列的$\boldsymbol{f}^{c'}$组成
- 每个$\boldsymbol{f}^{c'}$由$K^{c'}$定义
- $K(i,j)^{c'}_k$被称为Kernel。指标i,j是曲面指标，指标k对应输入Channel，c'对应输出的Channel。它是个四阶张量，就是CNN要学习的参数
- 我们约定上式的加项里，如果$u'+i, v'+j$越界（小于0或大于输入的行列数），那么这项不含入。

卷积层f的完整形式

完整形式只需加上bias项：

$$Y^{c'} = K^{c'} \star X + b^{c'}$$

相应的分量形式：

$$Y^{c'}_{u',v'} = \sum_{i=-d}^{d} \sum_{j=-d}^{d} \sum_{k=1}^{n_c} K(i,j)^{c'}_{k} \cdot X^{k}_{u'+i,v'+j} + b^{c'}_{u',v'}$$

使用$d=2$，对于开始的例子Kernel大小是$(2d+1)^2 n_c n_{c'}$，
即$5\times5\times3\times3$，我们只需要$25\times9+640\times480\times3=921825$个参数。

和Affine的关系

它其实可以看作Affine变换，只是很多位置weight是0，而非零的地方的weight被共享。Kernel就是这些被不同位置的输出所共享的weight。

这是向前的形式，我们下面推导向后的公式。

目录

1 背景和大纲
2 ML和数学的复习
- Machine Learning超简单的简介
- 求导的复习
- 梯度和张量，Jacobian和Hessian

3 反向传播算法
- 神经网络概念
- 一个数据点上的BP
- Batched BP

4 具体的Layer：Affine和ReLU层
- Affine和ReLU层定义
- Affine和ReLU层的Jacobian
- Affine和ReLU层的BP

5 卷积神经网络
- 卷积运算
- 卷积层BP
- padding和stride
- Pooling层

6 Loss层的梯度

Local gradient分量形式

向下层传递

$$\frac{\partial Y^{c'}_{u',v'}}{\partial X^{c}_{u,v}} = \sum_{i,j,k} K(i,j)^{c'}_{k} \cdot \delta_{u'+i,u} \cdot \delta_{v'+j,v} \cdot \delta_{k,c}$$
$$= K(u-u', v-v')^{c'}_{c} \cdot 1_{|u-u'|\le d, |v-v'|\le d}$$

对K的更新

$$\frac{\partial Y^{c'}_{u',v'}}{\partial K(i',j')^{c}_{k'}} = \delta_{c,c'} \cdot \sum_{i,j,k} X^{k}_{u'+i,v'+j} \cdot \delta_{i,i'} \cdot \delta_{j,j'} \cdot \delta_{k,k'}$$
$$= X^{k'}_{u'+i',v'+j'} \cdot \delta_{c,c'}$$

对b的更新

$$\frac{\partial Y^{c'}_{u',v'}}{\partial b^{c}_{u,v}} = \delta_{u,u'} \cdot \delta_{v,v'} \cdot \delta_{c,c'}$$

卷积层BP

为了减少符号混乱，层的指标使用希腊字母ι写到括号里。

第ι层的参数$K(\iota), b(\iota)$

$$X(\iota)^c_{u,v} = \sum_{i,j,k} K(\iota)(i,j)^c_k X(\iota-1)^k_{u+i,v+i} + b(\iota)^c_{u,v}$$

Loss到ι反馈

$$\delta X(\iota)^c_{u,v} = \frac{\partial l}{\partial X(\iota)^c_{u,v}}$$

$\delta X(\iota)$到$\delta X(\iota-1)$的反向公式

$$\begin{aligned}
\delta X(\iota-1)^c_{u,v} &= \frac{\partial l}{\partial X(\iota-1)^c_{u,v}} = \sum_{u',v',c'} \frac{\partial l}{\partial X(\iota)^{c'}_{u',v'}} \cdot \frac{\partial X(\iota)^{c'}_{u',v'}}{\partial X(\iota-1)^c_{u,v}} \\
&= \sum_{u',v',c'} \delta X(\iota)^{c'}_{u',v'} \cdot K(\iota)(u-u',v-v')^{c'}_c \\
&= \sum_{i=-d}^{d} \sum_{j=-d}^{d} \sum_{k=1}^{n_{c'}(\iota)} K(\iota)(i,j)^k_c \cdot \delta X(\iota)^k_{u-i,v-j}
\end{aligned}$$

引入$\tilde{K}(\iota)(i,j)^c_k = K(\iota)(-i,-j)^k_c$，即新张量$\tilde{K}$是原来$K$张量上两个指标的镜像，另两个指标的转置，那么

卷积层的BP

$$\delta X(\iota-1)^c_{u,v} = \sum_{i=-d}^{d}\sum_{j=-d}^{d}\sum_{k=1}^{n_c(\iota)} \tilde{K}(\iota)(i,j)^c_k \cdot \delta X(\iota)^k_{u+i,v+j}$$

即

$$\delta X(\iota-1)^c = \tilde{K}(\iota)^c \star \delta(\iota)$$

反向仍然是卷积变换，只是Kernel变成了$\tilde{K}(i,j)^c_{c'}$。可以对比正向卷积：

卷积层的正向传播

$$X(\iota)^{c'} = K(\iota)^{c'} \star X(\iota-1) + b(\iota)^{c'}$$

分量形式：

$$X(\iota)^{c'}_{u',v'} = \sum_{i=-d}^{d}\sum_{j=-d}^{d}\sum_{k=1}^{n_c(\iota)} K(\iota)(i,j)^{c'}_k \cdot X(\iota-1)^k_{u'+i,v'+j} + b(\iota)^{c'}_{u',v'}$$

Weigth Update

卷积层的Weigth Update: $\mathrm{d}\,K$张量

$$\begin{aligned}
\mathrm{d}\,K(\iota)(i',j')^{k}_{k'} &= \frac{\partial l}{\partial K(\iota)(i',j')^{k}_{k'}} = \sum_{u',v',c'} \frac{\partial l}{\partial X(\iota)^{c'}_{u',v'}} \cdot \frac{\partial X(\iota)^{c'}_{u',v'}}{\partial K(\iota)(i',j')^{k}_{k'}} \\
&= \sum_{u',v',c'} \delta X(\iota)^{c'}_{u',v'} \cdot X(\iota-1)^{k'}_{u'+i',v'+j'} \cdot \delta_{k,c'} \\
&= \sum_{u',v'} \delta X(\iota)^{k}_{u',v'} \cdot X(\iota-1)^{k'}_{i'+u',j'+v'}
\end{aligned}$$

即$\delta X(\iota)^{k}_{u',v'}$为Kernel的二维卷积$\mathrm{d}\,K(\iota)^{k}_{k'} = \delta X(\iota)^{k} * X(\iota-1)^{k'}$

卷积层的Weigth Update: $\mathrm{d}\,b$张量

$$\mathrm{d}\,b(\iota)^{c'}_{u',v'} = \frac{\partial l}{\partial b(\iota)^{c'}_{u',v'}} = \sum_{u'',v'',c''} \frac{\partial l}{\partial X(\iota)^{c''}_{u'',v''}} \cdot \frac{\partial X(\iota)^{c''}_{u'',v''}}{\partial b(\iota)^{c'}_{u',v'}} = \delta X(\iota)^{c'}_{u',v'}$$

Summary

回忆我们用$\star$记录三维卷积，用$*$记录二维卷积；前面公式写作：

正向

$$X(\iota)^{c'} = K(\iota)^{c'} \star X(\iota-1) + b(\iota)^{c'}$$

反向

$$\delta X(\iota-1)^{c} = \tilde{K}(\iota)^{c} \star \delta X(\iota)$$

update for K

$$\mathrm{d}\, K(\iota)^{k}_{k'} = \delta X(\iota)^{k} * X(\iota-1)^{k'}$$

update for b

$$\mathrm{d}\, b(\iota) = \delta X(\iota)$$

目录

1 背景和大纲
2 ML和数学的复习
- Machine Learning超简单的简介
- 求导的复习
- 梯度和张量，Jacobian和Hessian

3 反向传播算法
- 神经网络概念
- 一个数据点上的BP
- Batched BP

4 具体的Layer：Affine和ReLU层
- Affine和ReLU层定义
- Affine和ReLU层的Jacobian
- Affine和ReLU层的BP

5 卷积神经网络
- 卷积运算
- 卷积层BP
- padding和stride
- Pooling层

6 Loss层的梯度

Feed forward with stride

回到最简单的卷积算子

$$Y^{c'}_{u',v'} = \sum_{i,j,k} K(i,j)^{c'}_k \cdot X^k_{u'+i,v'+j}$$

这里输入尺寸和输出尺寸是一样的。
如果输出的尺寸u', v'和输入尺寸不同，那么就要引入一个不同的stride（相当于对图像缩放）s:

带有stride的卷积层

$$Y^{c'}_{u',v'} = \sum_{i,j,k} K(i,j)^{c'}_k \cdot X^k_{u'\cdot s+i,v'\cdot s+j}$$

所以s物理意义是，输出上每移动一个单位，输入的采样中心需要移动s个单位。如果原图是$n_x \times n_y$，那么输出是$\frac{n_x}{s} \times \frac{n_y}{s}$尺寸的。

stride local gradient and BP

local gradient

$$\frac{\partial Y^{c'}_{u',v'}}{\partial X^{c}_{u,v}} = \sum_{i,j,k} K(i,j)^{c'}_{k} \cdot \delta_{u's+i,u} \cdot \delta_{v's+j,v} \cdot \delta_{k,c}$$
$$= K(u-u's, v-v's)^{c'}_{c}$$

BP

$$\delta X(\iota-1)^{c}_{u,v} = \sum_{u',v',c'} \delta X(\iota)^{c'}_{u',v'} \cdot K(\iota)(u-u's, v-v's)^{c'}_{c}$$
$$= \sum_{i=-d}^{d} \sum_{j=-d}^{d} \sum_{k=1}^{n_c(\iota)} K(\iota)(i,j)^{k}_{c} \cdot \delta X(\iota)^{k}_{\lfloor \frac{u-i}{s} \rfloor, \lfloor \frac{v-j}{s} \rfloor}$$

stride下和最简形式的联系

如果引入记号

$\tilde{K}$

$$\tilde{K}(\iota)(i,j)^c_k = K(\iota)(-i,-j)^k_c$$

$\widetilde{\delta X}$

$$\widetilde{\delta X}(\iota)^k = \delta X(\iota)^k \otimes (\mathbb{1}\cdot\mathbb{1}^T)$$

这里$\mathbb{1}\cdot\mathbb{1}^T$是$s\times s$阶全1的常数矩阵。右边Kronecker乘积操作相当于把反馈信号尺寸放大s倍–原来每个位置用$s\times s$的常数块代替。那么反向还是可以写成普通（3维）的卷积

BP with stride

$$\delta X(\iota-1)^c = \tilde{K}(\iota)^c \star \widetilde{\delta X}(\iota)$$

stride下对K的更新

Local gradient, no stride

$$\frac{\partial Y^{c'}_{u',v'}}{\partial K(i',j')^{c}_{k'}} = X^{k'}_{u'+i',v'+j'} \cdot \delta_{c,c'}$$

只要在X相关的指标中用$u's$代替u'，用$v's$代替v'

Local gradient, with stride s

$$\frac{\partial Y^{c'}_{u',v'}}{\partial K(i',j')^{c}_{k'}} = X^{k'}_{u's+i',v's+j'} \cdot \delta_{c,c'}$$

卷积层的Weigth Update，$\mathrm{d}\,K$张量，with stride s

$$\begin{aligned}\mathrm{d}\,K(\iota)(i',j')^{k}_{k'} &= \sum_{u',v'} \delta X(\iota)^{k}_{u',v'} \cdot X(\iota-1)^{k'}_{i'+u's,j'+v's} \\ &= \sum_{i,j} X(\iota-1)^{k'}_{i,j} \cdot \delta X(\iota)^{k}_{\lfloor\frac{i-i'}{s}\rfloor,\lfloor\frac{j-j'}{s}\rfloor}\end{aligned}$$

padding

而padding是为了处理边界问题。例如：当$(u', v') = (0, 0)$时，对$i < 0, j < 0$的指标，相当于pad了d层0。

最简形式已经pad了d层

$$X_{(-d:-1),:} = X_{:,(-d:-1)} = X_{(n_x:n_x+d),:} = X_{:,(n_y:n_y+d)} = 0$$

如果输出中不希望有padding成分，可以slice一个子块

$$Y^{c'}_{d:(n_x-d-1),d:(n_y-d-1)}$$

一般padding

如果我们希望pad其他尺寸p，那么可以用

$$Y^{c'}_{u',v'} = \sum_{i,j,k} K(i,j)^{c'}_k \cdot X^k_{u'+i+(p-d),v'+j+(p-d)}$$

的公式。

它的相应公式可以类似推导。

目录

1 背景和大纲

2 ML和数学的复习
- Machine Learning超简单的简介
- 求导的复习
- 梯度和张量，Jacobian和Hessian

3 反向传播算法
- 神经网络概念
- 一个数据点上的BP
- Batched BP

4 具体的Layer：Affine和ReLU层
- Affine和ReLU层定义
- Affine和ReLU层的Jacobian
- Affine和ReLU层的BP

5 卷积神经网络
- 卷积运算
- 卷积层BP
- padding和stride
- Pooling层

6 Loss层的梯度

Pooling Layer

上面我们看到使用不同stride可以改变图像大小。有时候需要一个强制的缩放，而不想要一个卷积层。这就是所谓的Pooling。假设我们把原来的$s \times s$的小块缩成一个像素点，新像素点的强度取原来小块的最大值，就得到max pooling。

max pooling

$$X(\iota)^{c'}_{u',v'} = \max_{i,j\in\{0,\dots,s-1\}} X(\iota-1)^{c'}_{u's+i,v's+j}$$

这是个non-linear映射

当然，另一个自然的想法是用小块的平均值作为缩小后的图的像素点的值。

mean pooling

$$\begin{aligned} X(\iota)^{c'}_{u',v'} &= \text{Average}_{i,j\in\{0,\dots,s-1\}}(X(\iota-1)^{c'}_{u's+i,v's+j}) \\ &= \frac{1}{s^2}\mathbb{1}^T X(\iota-1)^{c'}_{u's:(u's+s-1),v's:(v's+s-1)}\mathbb{1} \end{aligned}$$

是linear的

Local gradient for Pooling Layer

gradient of $\max$

在可以求导的点上偏导是$\frac{\partial \max(X)}{\partial X_i} = \delta_{i,\mathrm{argmax}(X)}$，所以

$$\nabla_X \max(X) = e^T_{\mathrm{argmax}(X)}$$

BP of max pooling

$$\delta X(\iota - 1)^c_{u,v} = \begin{cases} \delta X(\iota)^c_{\lfloor \frac{u}{s} \rfloor, \lfloor \frac{v}{s} \rfloor} & X(\iota - 1)^c_{u,v} = X(\iota - 1)^c_{\lfloor \frac{u}{s} \rfloor, \lfloor \frac{v}{s} \rfloor} \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

也就是取最大值处“导通”传回，其他地方阻断。

mean pooling

$$\delta X(\iota - 1)^c_{u,v} = \frac{1}{s^2} \delta X(\iota)^c_{\lfloor \frac{u}{s} \rfloor, \lfloor \frac{v}{s} \rfloor}$$

信号强度会变小s^2倍，所以实际中这种pooling不常用

目录

1 背景和大纲
2 ML和数学的复习
- Machine Learning超简单的简介
- 求导的复习
- 梯度和张量，Jacobian和Hessian

3 反向传播算法
- 神经网络概念
- 一个数据点上的BP
- Batched BP

4 具体的Layer：Affine和ReLU层
- Affine和ReLU层定义
- Affine和ReLU层的Jacobian
- Affine和ReLU层的BP

5 卷积神经网络
- 卷积运算
- 卷积层BP
- padding和stride
- Pooling层

6 Loss层的梯度

最后一块拼图

平方误差

$$\delta S = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\, s}(y - s)^2 = 2(s - y)$$

Logistic $0/1$

$$\delta S = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\, s} L = \varphi(s) - y$$

Logistic ± 1

$$\delta S = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\, s} L = -y \cdot \varphi(-y \cdot s)$$

最后一块拼图

用e_i表示$\mathbb{R}^m$的标准正交基（也称为one hot向量）

$$e_i = \underbrace{(0, \cdots, 1, \cdots, 0)^T}_{\text{i-th position is } 1\text{, other are zero}} \in \mathbb{R}^m$$

Cross Entropy

引入记号$\mathbf{p}$代表softmax给出的概率分布：

$$\mathbf{p} = \left(\frac{e^{s_1}}{\sum_j e^{s_j}}, \ldots, \frac{e^{s_m}}{\sum_j e^{s_j}} \right)$$

用$\mathbf{y}$代表y给出的概率分布$\mathbf{y} = e_y^T$，那么

$$\delta S = \nabla_S L = \mathbf{p} - \mathbf{y}$$

最后一块拼图

SVM loss

用△记那些得分加上margin后比正确的类y的得分还要高的类，那么

$$\delta S = \nabla_S L = \sum_{j \in \triangle} e_j^T - |\triangle| \cdot e_y^T$$

Cross Entropy和SVM loss的物理意义

$$\begin{aligned} \delta S_{\text{Cross Entropy}} &= (p_1, p_2, \ldots, p_y - 1, \ldots, p_m) \\ \delta S_{\text{SVM loss}} &= (0, 1, \ldots, 1_{\text{position} \in \triangle}, \ldots, -|\triangle|, \ldots, 0) \end{aligned}$$

都是错误的方向上要减一个大的正数，正确方向上减一个大的负数。

终于告一段落啦

“雷姆雷姆，
好像真的不难
耶。。。”

“姐姐姐姐，
数学–好有趣
呢！”

下周再见

“今天讲了

- BP算法
- 具体公式的推导
- 卷积层

有点抽象哦”

“下次我们是要看看它们如何代码化的，对吗？真期待。。。”