手写字符识别（下）

赵耀

回顾

- 既然希望神经网络的输出尽可能的接近真正想要预测的值，那么就可以通过比较当前网络的**预测值**与**目标值**，根据两者的差异情况来更新每一层的权重矩阵。
  - 如何比较差异情况？ 损失函数(loss function)
  - 如何更新权重矩阵？梯度下降(Gradient descend)

回顾

- 损失函数，又称为误差函数（error function ），也有叫cost function。是用于衡量预测值和目标值差异的函数。
- loss function的输出值越高表示差异性越大，那么神经网络的训练目标就是尽可能的缩小差异
- 本次实验中采用的loss function为：$E(w)=\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\sum_{k=1}^{k}-t_k^n ln y_k(x_n,w)$（推导过程详见准备知识.pdf文档）。训练目标是调整w，使得$E(w)$最小

回顾

- 梯度下降：通过使loss值向当前点对应梯度的反方向不断移动，来降低loss。一次移动多少是由学习速率（learning rate）来控制的。
  - 难点1：有可能梯度下降只能找到局部最小值，找不到全局最小值
  - 难点2：如何快速的计算梯度？如何更新隐藏层的权重？本次实验用到的是反向传播算法。（反向传播算法是一种计算梯度的方法，其贡献如同FFT）

背景知识

- 链式法则是微积分中的求导法则，用以求一个复合函数的导数。所谓的复合函数，是指以一个函数作为另一个函数的自变量。
- 链式法则描述：若h(x)=f(g(x))，则h’ (x)=f’(g(x))g’(x)
- 例子：

例如f(x)=2x+2，g(x)=3x+3，g(f(x))就是一个复合函数，并且g'(f(x))=6

误差反向传播-整体代价函数

- 训练目标是调整W，使得损失函数$E(w)=\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\sum_{k=1}^{k}-t_k^n lny_k(x_n,w)$越来越小
- 在批量梯度下降法中，给定一个包含N个样例的数据集，我们可以定义整体代价函数为：$E_{total}(w,b)=\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}E\left(W^{(t)},B^{(t)}\right)+\frac{\lambda}{2}||W^{(t)}||_2^2$
- 第二项是一个正则化项（也叫**权重衰减项**）：L_2正则，其目的是减小权重的幅度，防止过度拟合。

梯度下降

- 梯度下降：通过使loss值向当前点对应梯度的反方向不断移动，来降低loss。 t+1次迭代的W是上一次的$W^{(t)}$减去η* $E_{total}(W^{(t)},B^{(t)})$对$W^{(t)}$的偏导值，同样的方式处理$B$偏置向量。一次移动多少是由学习速率$\eta$来控制的。在本实验中，前50的大周期推荐设置$\eta$=0.1；后50次的大周期推荐设置$\eta$=0.01。
- $\mathrm{W}^{(t+1)} = \mathrm{W}^{(t)} - \eta \frac{\partial E_{total}(W^{(t)},B^{(t)})}{\partial W^{(t)}}$
- $B^{(t+1)} = B^{(t)} - \eta \frac{\partial E_{total}(W^{(t)},B^{(t)})}{\partial B^{(t)}}$

难点在于偏导怎么计算？

- $\frac{\partial E_{total}(W^{(t)},B^{(t)})}{\partial W^{(t)}}$

$=\frac{\partial(\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} E_n(W^{(t)},B^{(t)})+\frac{\lambda}{2}||W^{(t)}||^2)}{\partial W^{(t)}}$

$=\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\frac{\partial E_n(W^{(t)},B^{(t)})}{\partial W^{(t)}}+\lambda W^{(t)}$

- $\frac{\partial E_{total}(W^{(t)},B^{(t)})}{\partial B^{(t)}}=\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\frac{\partial E_n(W^{(t)},B^{(t)})}{\partial B^{(t)}}$

回顾一次迭代前向计算的过程

$z_j^{(1)}=f(a_j^{(1)})$

$z_j^{(2)}=f(a_j^{(2)})$

$y_l=\sigma\left(a_l^{(3)}\right)$

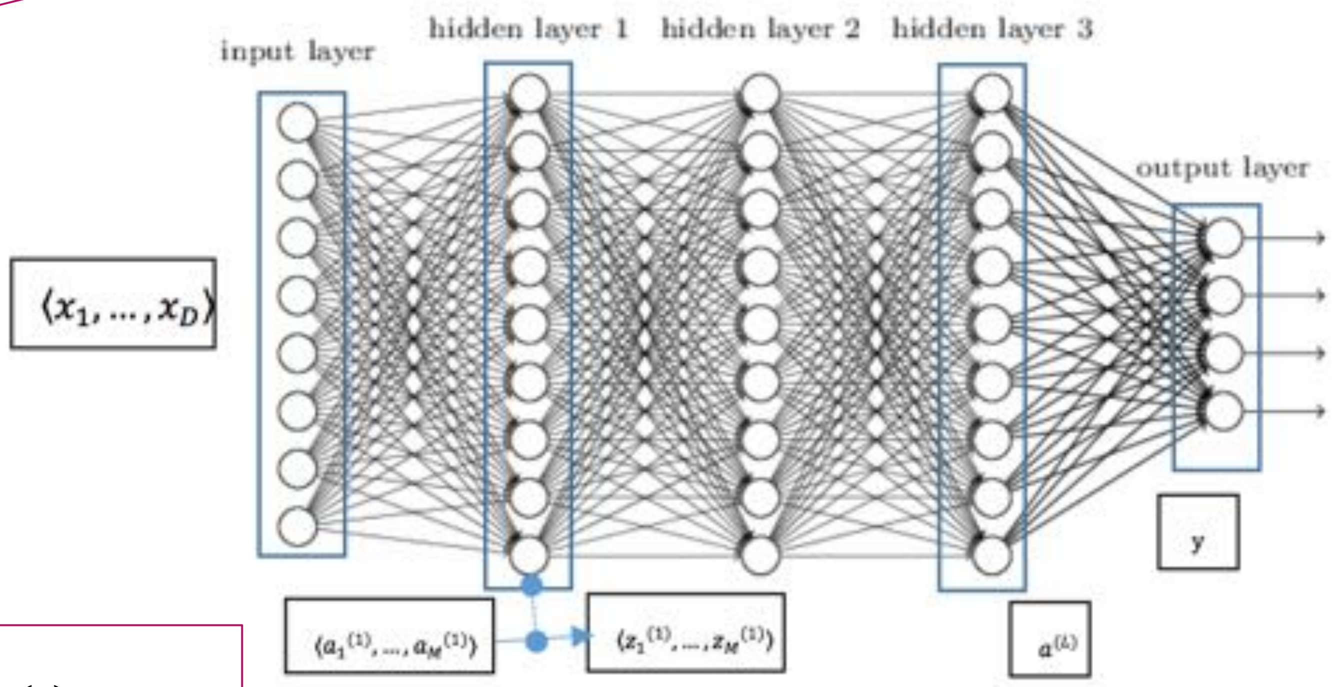
$$x \to a^{(1)} \to z^{(1)} \to a^{(2)} \to z^{(2)} \to a^{(3)} \to y$$

$$a_j^{(1)}=\sum_{i=1}^{D} w_{ji}^{(1)} x_i + b_j$$

$$a_k^{(2)}=\sum_{j=1}^{M} w_{kj}^{(2)} z_j + b_k$$

$$a_l^{(3)}=\sum_{k=1}^{N} w_{lk}^{(3)} z_k + b_l$$

此处w的上标为w矩阵所处的层数，在一次迭代的计算中，t就没必要了



E对$w^{(3)}$，$b^{(3)}$求导

- $\frac{\partial E}{\partial W^{(3)}} = \boxed{\frac{\partial E\,(y)}{\partial y}\frac{\partial y(a^{(3)})}{\partial a^{(3)}}}\frac{\partial a^{(3)})}{\partial w^{(3)}}$
- $\frac{\partial E}{\partial b^{(3)}} = \boxed{\frac{\partial E\,(y)}{\partial y}\frac{\partial y(a^{(3)})}{\partial a^{(3)}}}\frac{\partial a^{(3)})}{\partial b^{(3)}}$

记为：$\delta^{(3)} = \frac{\partial E}{\partial a^{(3)}} = \frac{\partial E\,(y)}{\partial y}\frac{\partial y(a^{(3)})}{\partial a^{(3)}}$

$z_j^{(1)} = f(a_j^{(1)})$

$z_j^{(2)} = f(a_j^{(2)})$

$y_l = \sigma\left(a_l^{(3)}\right)$

$$x \to a^{(1)} \to z^{(1)} \to a^{(2)} \to z^{(2)} \to a^{(3)} \to y$$

$$a_j^{(1)} = \sum_{i=1}^{D} w_{ji}^{(1)} x_i + b_j^{(1)}$$

$$a_k^{(2)} = \sum_{j=1}^{M} w_{kj}^{(2)} z_j^{(1)} + b_k^{(2)}$$

$$a_l^{(3)} = \sum_{k=1}^{N} w_{lk}^{(3)} z_k^{(2)} + b_l^{(3)}$$

求导$\delta^{(3)}$-1

- $\delta^{(3)} = \frac{\partial E\,(y)}{\partial y}\frac{\partial y(a^{(3)})}{\partial a^{(3)}} = \frac{\partial \sum_{k=1}^{10} -t_k^n lny_k}{\partial y}\frac{\partial(\boxed{\frac{e^{a_k^{(3)}}}{\sum_{k=1}^{10} e^{a_k^{(3)}}}})}{\partial a^{(3)}}$ → y_k
- 假设t_k^{10}中k=j的时候t_j^n位为1，那么当k=j时：
- $\delta_j^{(3)} = \frac{\partial(-lny_j)}{\partial y_j}\frac{\partial(\frac{e^{a_j^{(3)}}}{\sum_{k=1}^{10} e^{a_k^{(3)}}})}{\partial a_j^{(3)}}$

=(- $\frac{1}{y_j}$) $\left(\frac{e^{a_j^{(3)}}\sum_{k=1}^{10} e^{a_k^{(3)}} - e^{a_j^{(3)}}e^{a_j^{(3)}}}{(\sum_{k=1}^{10} e^{a_k^{(3)}})^2}\right)$

=(- $\frac{1}{y_j}$) $\left(\frac{e^{a_j^{(3)}}}{\sum_{k=1}^{10} e^{a_k^{(3)}}} - \frac{e^{a_j^{(3)}}e^{a_j^{(3)}}}{(\sum_{k=1}^{10} e^{a_k^{(3)}})^2}\right)$

=(- $\frac{1}{y_j}$) $(y_j - y_j^2)$=$y_j - 1$

相关求导公式：

$y = lnx \quad y' = \frac{1}{x}$

$y = e^x \quad y' = e^x$

$y = x^n \quad y' = nx^{n-1}$

$$\left(\frac{v(x)}{u(x)}\right)' = \frac{u(x)v'(x) - u'(x)v(x)}{(u(x))^2}$$

求导$\delta^{(3)}$-2

- 假设t_k^n中k=j的时候t_j^n位为1，那么当$k \neq j$时：
- $$\delta_i^{(3)} = \frac{\partial(-ln y_j)}{\partial y_j} \frac{\partial\left(\frac{e^{a_j^{(3)}}}{\sum_{k=1}^{10} e^{a_k^{(3)}}}\right)}{\partial a_i^{(3)}}$$

$$=(-\frac{1}{y_j})\left(\frac{0*\sum_{k=1}^{10} e^{a_k^{(3)}} - e^{a_j^{(3)}} e^{a_i^{(3)}}}{(\sum_{k=1}^{10} e^{a_k^{(3)}})^2}\right)$$

$$=(-\frac{1}{y_j})\left(-\frac{e^{a_j^{(3)}} e^{a_i^{(3)}}}{(\sum_{k=1}^{10} e^{a_k^{(3)}})^2}\right)$$

$$=(-\frac{1}{y_j})(-y_j y_i)=y_i$$

求导$\delta^{(3)}$-3

- 由于综合起来t_k^n中k=j的时候t_j^n位为1， $k \neq j$时为0，所以
- $\delta^{(3)} = y - t$

对$\frac{\partial E}{\partial w_{ij}^{(3)}}$，$\frac{\partial E}{\partial b_i^{(3)}}$求导

- $\frac{\partial E}{\partial w_{ij}^{(3)}} = \frac{\partial E}{\partial a_i^{(3)}} \frac{\partial (a_i^{(3)})}{\partial w_{ij}^{(3)}} = \frac{\partial E}{\partial a_i^{(3)}} \frac{\partial (\sum_{k=1}^{N} w_{ik}^{(3)} z_k^{(2)} + b_i^{(2)})}{\partial w_{ij}^{(3)}} = \delta_i^{(3)} z_j^{(2)}$
- 综合起来，$\frac{\partial E\,(W^{(3)}, b^{(3)})}{\partial W^{(3)}} = \delta^{(3)} (z^{(2)})^T$
- $\frac{\partial E}{\partial b_i^{(3)}} = \frac{\partial E}{\partial a_i^{(3)}} \frac{\partial (a_i^{(3)})}{\partial b_i^{(3)}} = \frac{\partial E}{\partial a_i^{(3)}} \frac{\partial (\sum_{k=1}^{N} w_{ik}^{(3)} z_k^{(2)} + b_i^{(2)})}{\partial b_i^{(3)}} = \delta_i^{(3)} * 1 = \delta_i^{(3)}$

E对$w^{(2)}$，$b^{(2)}$求导分解

- $$\frac{\partial E}{\partial W^{(2)}}=\boxed{\frac{\partial E\,(y)}{\partial y}\frac{\partial y(a^{(3)})}{\partial a^{(3)}}\frac{\partial a^{(3)})}{\partial z^{(2)}}\frac{\partial z^{(2)})}{\partial a^{(2)}}}\frac{\partial a^{(2)})}{\partial W^{(2)}}$$
- $$\frac{\partial E}{\partial b^{(2)}}=\boxed{\frac{\partial E\,(y)}{\partial y}\frac{\partial y(a^{(3)})}{\partial a^{(3)}}\frac{\partial a^{(3)})}{\partial z^{(2)}}\frac{\partial z^{(2)})}{\partial a^{(2)}}}\frac{\partial a^{(2)})}{\partial b^{(2)}}$$

记为：$\delta^{(2)}=\frac{\partial E\,(y)}{\partial y}\frac{\partial y(a^{(3)})}{\partial a^{(3)}}\frac{\partial a^{(3)})}{\partial z^{(2)}}\frac{\partial z^{(2)})}{\partial a^{(2)}}=\frac{\partial E}{\partial a^{(2)}}$

$$z_j^{(1)}=f(a_j^{(1)})\qquad z_j^{(2)}=f(a_j^{(2)})\qquad y_l=\sigma\left(a_l^{(3)}\right)$$

$$x\to a^{(1)}\to z^{(1)}\to a^{(2)}\to z^{(2)}\to a^{(3)}\to y$$

$$a_j^{(1)}=\sum_{i=1}^{D}w_{ji}^{(1)}x_i+b_j$$

$$a_k^{(2)}=\sum_{j=1}^{M}w_{kj}^{(2)}z_j^{(1)}+b_k^{(2)}$$

$$a_l^{(3)}=\sum_{k=1}^{N}w_{jk}^{(3)}z_k^{(2)}+b_k^{(3)}$$

求$\delta^{(2)}$

- $\delta_i^{(2)} = \sum_{j=1}^{L} \delta_j^{(3)} \frac{\partial a_j^{(3)}}{\partial z_i^{(2)}} \frac{\partial z_i^{(2)}}{\partial a_i^{(2)}}$

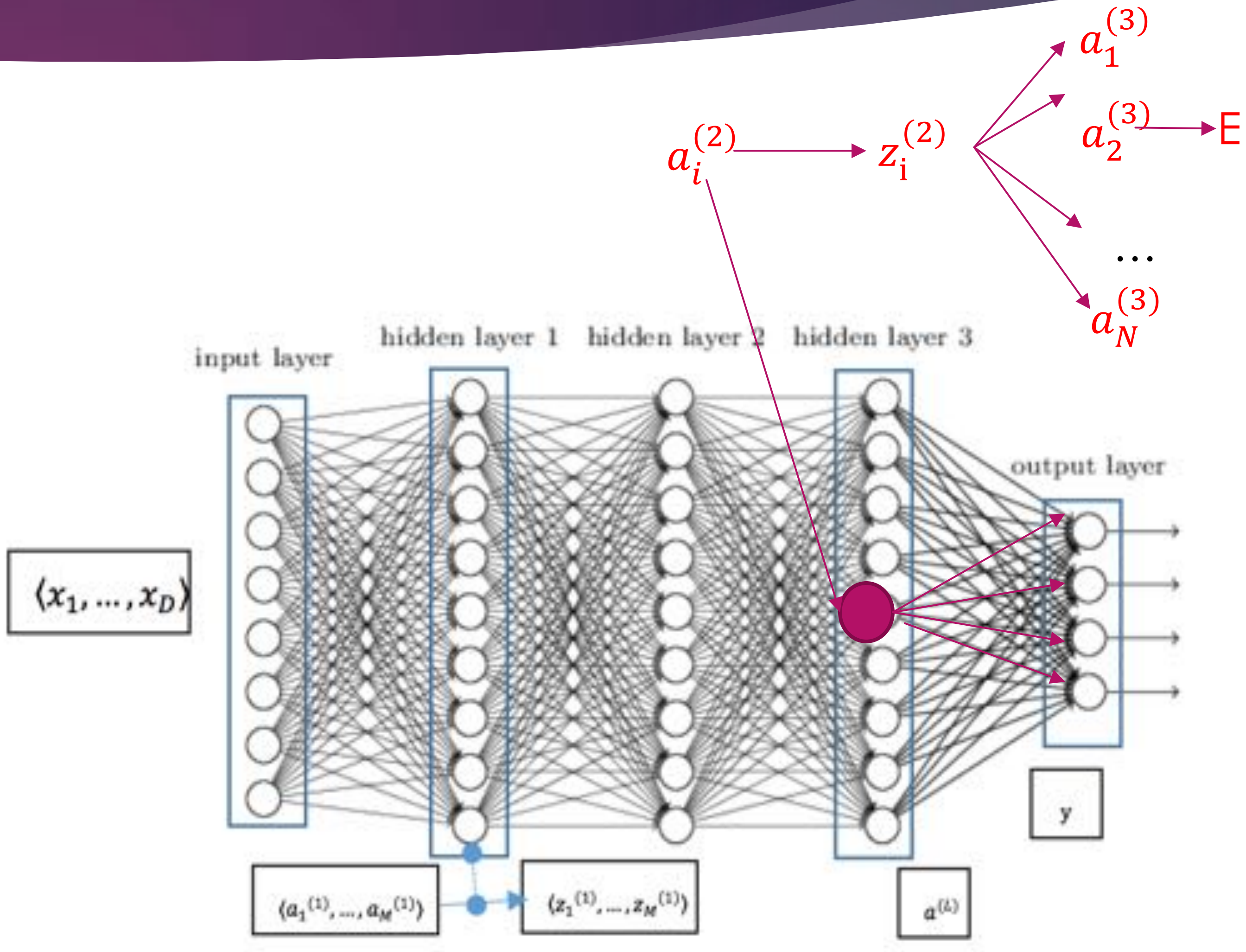
$= \sum_{j=1}^{L} \delta_j^{(3)} \frac{\partial(\sum_{k=1}^{N} w_{jk}^{(3)} z_k + b_k^{(3)})}{\partial z_i^{(2)}} \frac{\partial z_i^{(2)}}{\partial a_i^{(2)}}$

$= \sum_{j=1}^{L} \delta_j^{(3)} w_{ji}^{(3)} f'(z_i^{(2)})$

表示成矩阵的形式为：

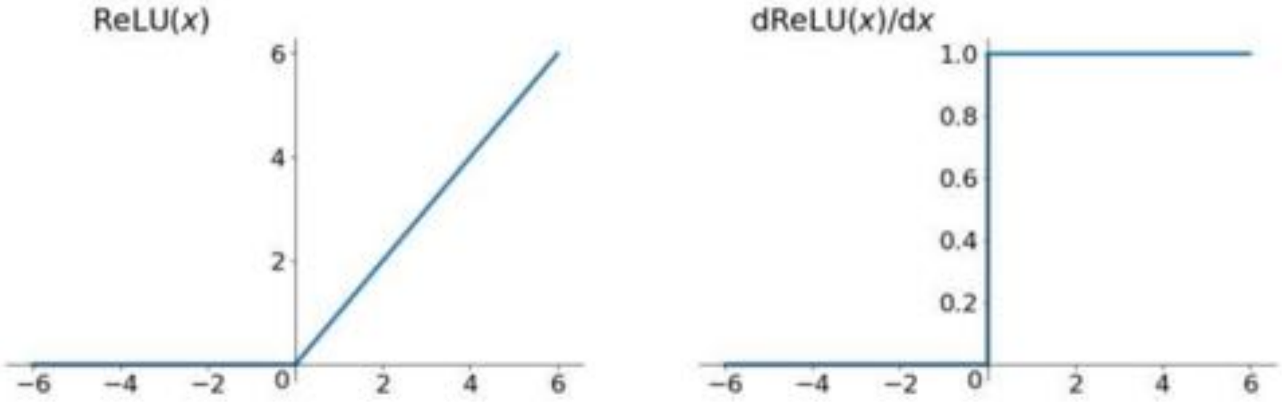
$\delta^{(2)} = \delta^{(3)} (w^{(3)})^T \odot f'(z^{(2)})$

此处，$z_j^{(2)} = f(a_j^{(2)})$， f为relu函数。



relu函数及其求导

- relu函数的定义： $f(x) = \max(0, x)$
- relu函数的导数： $f'(x) =$
  $\begin{cases} if\ x > 0, f'(x) = 1 \\ \quad else\ f'(x) = 0 \end{cases}$



对$\dfrac{\partial E}{\partial w_{ij}^{(2)}}$，$\dfrac{\partial E}{\partial b_i^{(2)}}$求导

- $\dfrac{\partial E}{\partial w_{ij}^{(2)}} = \dfrac{\partial E}{\partial a_i^{(2)}} \dfrac{\partial (a_i^{(2)})}{\partial w_{ij}^{(2)}} = \delta_i^{(2)} \dfrac{\partial (\sum_{j=1}^{M} w_{kj}^{(2)} z_j^{(1)} + b_k^{(2)})}{\partial w_{ij}^{(2)}} = \delta_i^{(2)} z_j^{(1)}$
- 综合起来，$\dfrac{\partial E}{\partial W^{(2)}} = \delta^{(2)} (z^{(1)})^T$
- $\dfrac{\partial E}{\partial b_i^{(2)}} = \dfrac{\partial E}{\partial a_i^{(2)}} \dfrac{\partial (a_i^{(2)})}{\partial b_i^{(2)}} = \dfrac{\partial E}{\partial a_i^{(2)}} \dfrac{\partial (\sum_{j=1}^{M} w_{kj}^{(2)} z_j^{(1)} + b_k^{(2)})}{\partial b_i^{(3)}} = \delta_i^{(2)} * 1 = \delta_i^{(2)}$

对$\frac{\partial E}{\partial w_{ij}^{(1)}}$，$\frac{\partial E}{\partial b_i^{(1)}}$求导

- 同$\delta^{(2)}$的过程，求出：$\delta^{(1)} = \delta^{(2)}(w^{(2)})^T \odot f'(z^{(1)})$
- $\frac{\partial E}{\partial W^{(1)}}=\delta^{(1)}(x)^T$
- $\frac{\partial E}{\partial b^{(1)}}=\delta^{(1)}$

综上，误差反向传播求导及调整步骤

- 求出输出层的$\delta^{(3)}$：本例中经过推导 $\delta^{(3)} = y - t$
- 求出$\frac{\partial E}{\partial w_{ij}^{(3)}}$，$\frac{\partial E}{\partial w_{ij}^{(3)}}$：本例中经过推导 $\frac{\partial E}{\partial w_{ij}^{(3)}} = \delta_i^{(3)} z_j^{(2)}$，$\frac{\partial E}{\partial b_i^{(3)}} = \delta_i^{(3)}$，推导时从后往前，i表示的是L+1层维度，j表示的是L层维度，然而前向计算时矩阵W的i表示的是L层维度，j表示L+1层维度，这里要特别注意。此处以前置矩阵定义为主。所以以下做调整时是有将推导的公式做了转置处理。
- 调整$W^{(3)(t+1)} = W^{(3)(t)} - \eta \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} \frac{\partial E}{\partial W^{(3)(t)}} - \eta \lambda W^{(3)(t)} = W^{(3)(t)} - \eta z^{(2)(T)} \delta^{(3)} - \eta \lambda W^{(3)(t)}$，此处的加入的$t$表示的是迭代的次数，此处的$z$和$\delta$均为加了样本点维度的矩阵，跟推导时用的单个样本点不同。
- 调整$b^{(3)(t+1)} = b^{(3)(t)} - \eta \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} \delta_{ni}^{(3)}$， 此处的$\delta$为加了样本点维度的矩阵
- 求出倒数第二层的$\delta^{(2)}$：本例经过推导$\delta^{(2)} = \delta^{(3)} (w^{(3)(t)})^T \odot f'(z^{(2)})$
- 调整$W^{(2)(t+1)} = W^{(2)(t)} - \eta z^{(1)(T)} \delta^{(2)} - \eta \lambda W^{(2)(t)}$，此处的加入的$t$表示的是迭代的次数，此处的$z$和$\delta$均为加了样本点维度的矩阵，跟推导时用的单个样本点不同。
- 调整$b^{(2)(t+1)} = b^{(2)(t)} - \eta \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} \delta_{ni}^{(2)}$，此处的$\delta$为加了样本点维度的矩阵
- 求出第一层的$\delta^{(1)}$：本例经过推导$\delta^{(1)} = \delta^{(2)} (w^{(2)(t)})^T \odot f'(z^{(1)})$
- 调整$W^{(1)(t+1)} = W^{(1)(t)} - \eta x^{(T)} \delta^{(1)} - \eta \lambda W^{(1)(t)}$，此处的加入的$t$表示的是迭代的次数，此处的$x$和$\delta$均为加了样本点维度的矩阵，跟推导时用的单个样本点不同。
- 调整$b^{(1)(t+1)} = b^{(1)(t)} - \eta \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} \delta_{ni}^{(1)}$，此处的$\delta$为加了样本点维度的矩阵