

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 $E(w) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \sum_{k=1}^K -t_k^n \ln y_k(x_n, w)$ 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： $E_{total}(w, b) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N E(W^{(t)}, B^{(t)}) + \frac{\lambda}{2} \|W^{(t)}\|_2^2$
- ▶ 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 $\eta * E_{total}(W^{(t)}, B^{(t)})$ 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 η 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 $\eta=0.01$ 。

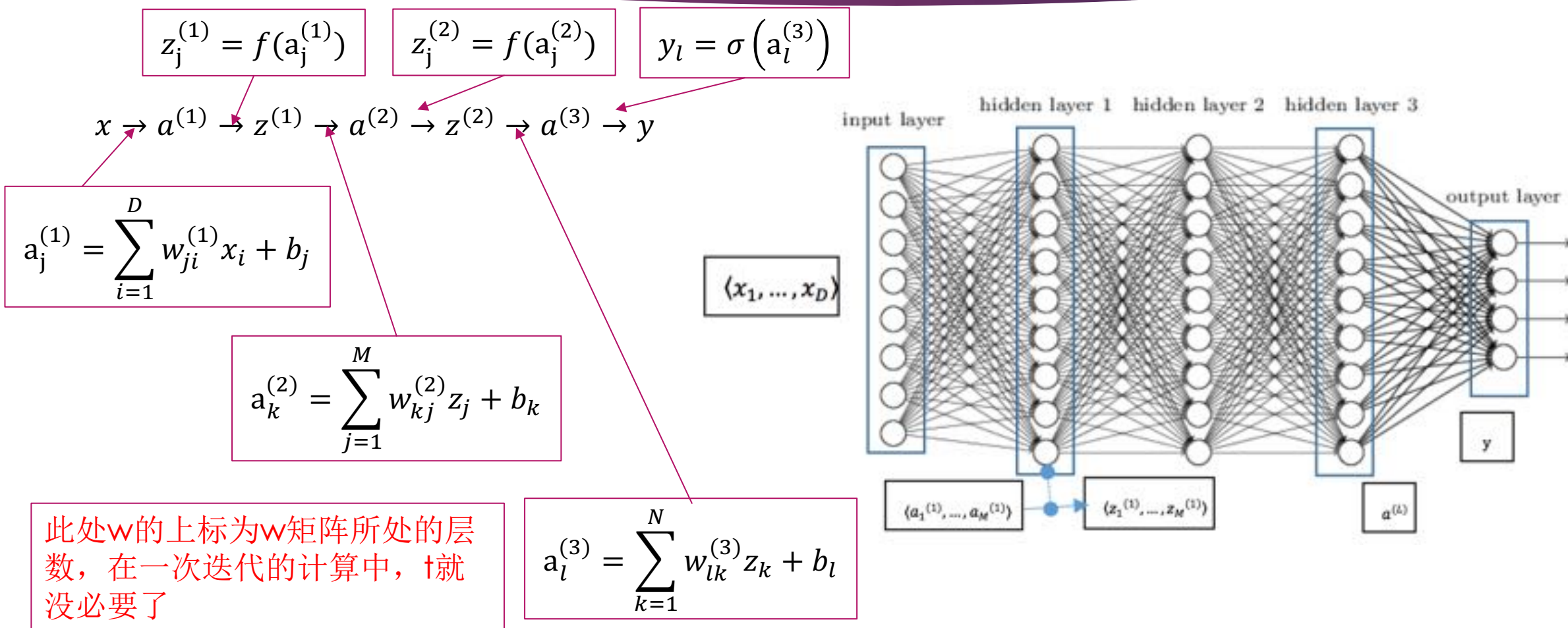
- ▶
$$W^{(t+1)} = W^{(t)} - \eta \frac{\partial E_{total}(W^{(t)}, B^{(t)})}{\partial W^{(t)}}$$

- ▶
$$B^{(t+1)} = B^{(t)} - \eta \frac{\partial E_{total}(W^{(t)}, B^{(t)})}{\partial B^{(t)}}$$

难点在于偏导怎么计算？

$$\begin{aligned} & \triangleright \frac{\partial E_{total}(W^{(t)}, B^{(t)})}{\partial W^{(t)}} \\ &= \frac{\partial (\frac{1}{N} \sum_{n=1}^N E_n(W^{(t)}, B^{(t)}) + \frac{\lambda}{2} ||W^{(t)}||^2)}{\partial W^{(t)}} \\ &= \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \frac{\partial E_n(W^{(t)}, B^{(t)})}{\partial W^{(t)}} + \lambda W^{(t)} \\ & \triangleright \frac{\partial E_{total}(W^{(t)}, B^{(t)})}{\partial B^{(t)}} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \frac{\partial E_n(W^{(t)}, B^{(t)})}{\partial B^{(t)}} \end{aligned}$$

回顾一次迭代前向计算的过程



E对 $w^{(3)}$, $b^{(3)}$ 求导

$$\triangleright \frac{\partial E}{\partial w^{(3)}} = \frac{\partial E(y)}{\partial y} \frac{\partial y(a^{(3)})}{\partial a^{(3)}} \frac{\partial a^{(3)}}{\partial w^{(3)}}$$

$$\triangleright \frac{\partial E}{\partial b^{(3)}} = \frac{\partial E(y)}{\partial y} \frac{\partial y(a^{(3)})}{\partial a^{(3)}} \frac{\partial a^{(3)}}{\partial b^{(3)}}$$

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

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

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

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

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

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

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

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

求导 $\delta^{(3)}$ -1

► $\delta^{(3)} = \frac{\partial E(y)}{\partial y} \frac{\partial y(a^{(3)})}{\partial a^{(3)}} = \frac{\partial \sum_{k=1}^{10} -t_k^n \ln y_k}{\partial y} \frac{\partial (\frac{e^{a_k^{(3)}}}{\sum_{k=1}^{10} e^{a_k^{(3)}}})}{\partial a^{(3)}} \longrightarrow y_k$

► 假设 t_k^{10} 中 $k=j$ 的时候 t_j^n 位为1, 那么当 $k=j$ 时:

► $\delta_j^{(3)} = \frac{\partial (-\ln y_j)}{\partial y_j} \frac{\partial (\frac{e^{a_j^{(3)}}}{\sum_{k=1}^{10} e^{a_k^{(3)}}})}{\partial a_j^{(3)}}$

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

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

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

相关求导公式:

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

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

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

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

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:

$$\text{► } \delta_i^{(3)} = \frac{\partial(-\ln y_j)}{\partial y_j} \frac{\partial(\frac{e^{a_j^{(3)}}}{\sum_{k=1}^{10} e^{a_k^{(3)}}})}{\partial a_i^{(3)}}$$

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

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

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

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

$$\blacktriangleright \frac{\partial E}{\partial w_{ij}^{(3)}} = \frac{\partial E}{\partial a_i^{(3)}} \frac{\partial (a_i^{(3)})}{\partial w_{ij}^{(3)}} = \frac{\partial E}{\partial a_i^{(3)}} \frac{\partial (\sum_{k=1}^N w_{ik}^{(3)} z_k^{(2)} + b_i^{(2)})}{\partial w_{ij}^{(3)}} = \delta_i^{(3)} z_j^{(2)}$$

$$\blacktriangleright \text{综合起来, } \frac{\partial E(W^{(3)}, b^{(3)})}{\partial W^{(3)}} = \delta^{(3)} (z^{(2)})^T$$

$$\blacktriangleright \frac{\partial E}{\partial b_i^{(3)}} = \frac{\partial E}{\partial a_i^{(3)}} \frac{\partial (a_i^{(3)})}{\partial b_i^{(3)}} = \frac{\partial E}{\partial a_i^{(3)}} \frac{\partial (\sum_{k=1}^N w_{ik}^{(3)} z_k^{(2)} + b_i^{(2)})}{\partial b_i^{(3)}} = \delta_i^{(3)} * 1 = \delta_i^{(3)}$$

E对 $w^{(2)}$, $b^{(2)}$ 求导分解

$$\triangleright \frac{\partial E}{\partial W^{(2)}} = \frac{\partial E(y)}{\partial y} \frac{\partial y(a^{(3)})}{\partial a^{(3)}} \frac{\partial a^{(3)}}{\partial z^{(2)}} \frac{\partial z^{(2)}}{\partial a^{(2)}} \frac{\partial a^{(2)}}{\partial W^{(2)}}$$

$$\triangleright \frac{\partial E}{\partial b^{(2)}} = \frac{\partial E(y)}{\partial y} \frac{\partial y(a^{(3)})}{\partial a^{(3)}} \frac{\partial a^{(3)}}{\partial z^{(2)}} \frac{\partial z^{(2)}}{\partial a^{(2)}} \frac{\partial a^{(2)}}{\partial b^{(2)}}$$

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

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

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

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

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

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

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

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

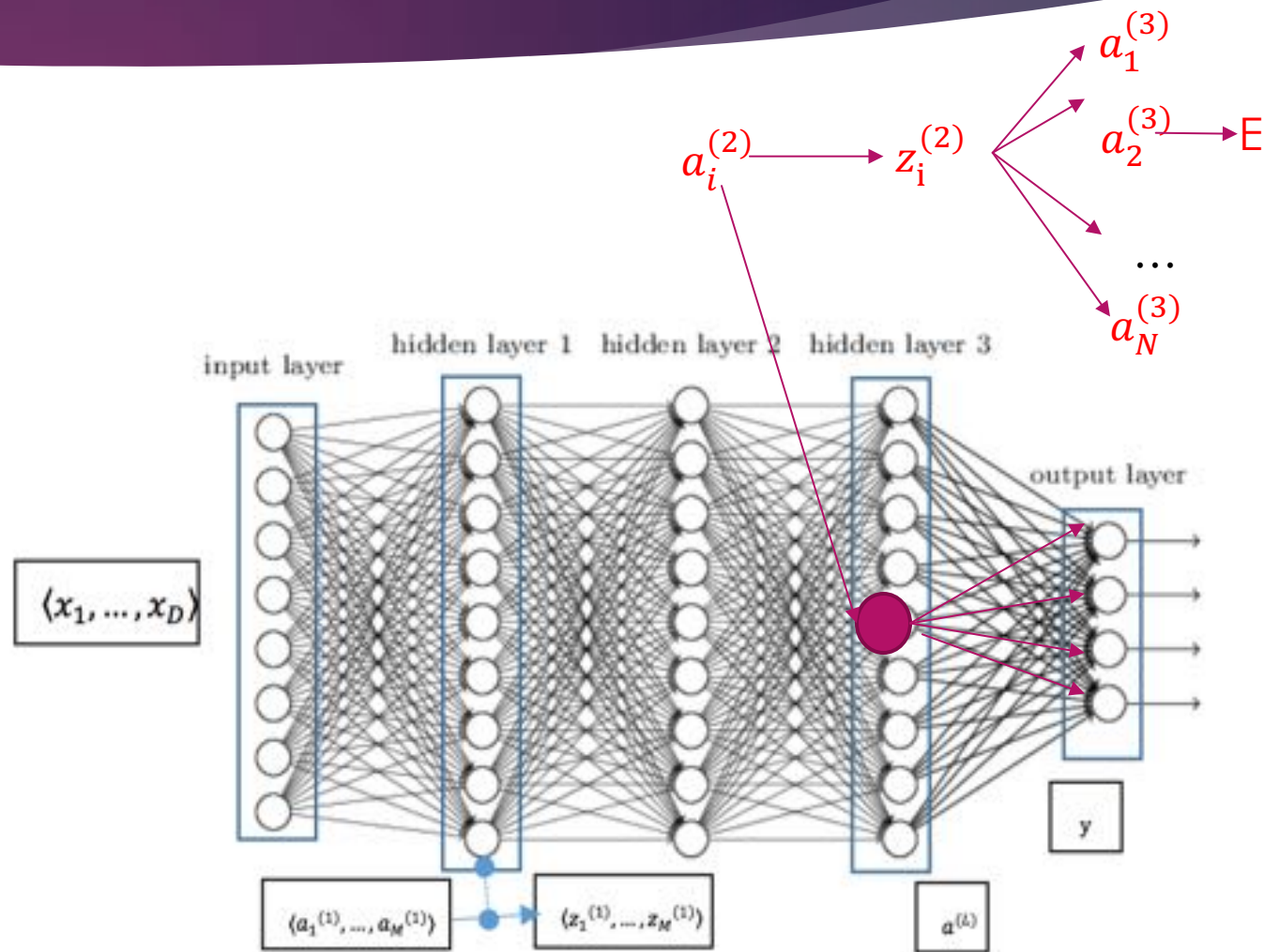
求 $\delta^{(2)}$

$$\begin{aligned} \blacktriangleright \delta_i^{(2)} &= \sum_{j=1}^L \delta_j^{(3)} \frac{\partial a_j^{(3)}}{\partial z_i^{(2)}} \frac{\partial z_i^{(2)}}{\partial a_i^{(2)}} \\ &= \sum_{j=1}^L \delta_j^{(3)} \frac{\partial (\sum_{k=1}^N w_{jk}^{(3)} z_k^{(2)} + b_j^{(3)})}{\partial z_i^{(2)}} \frac{\partial z_i^{(2)}}{\partial a_i^{(2)}} \\ &= \sum_{j=1}^L \delta_j^{(3)} w_{ji}^{(3)} f'(z_i^{(2)}) \end{aligned}$$

表示成矩阵的形式为：

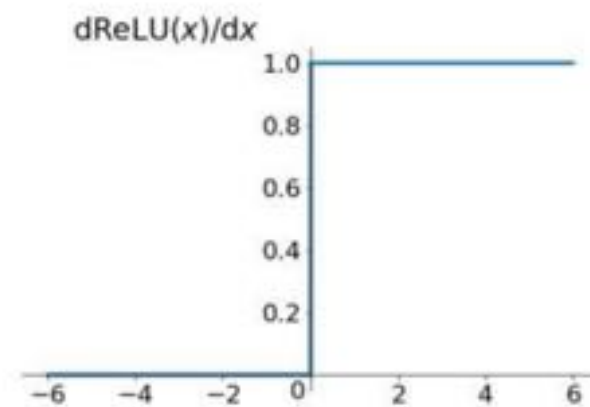
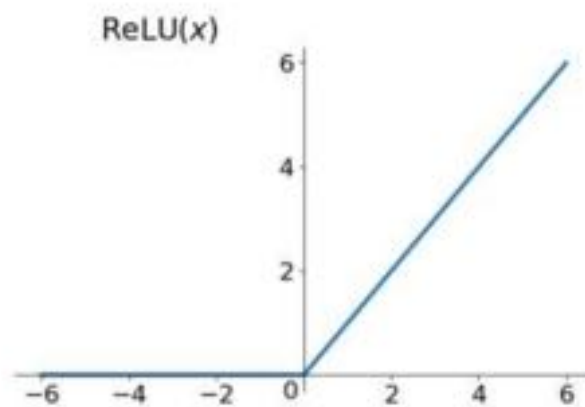
$$\delta^{(2)} = \delta^{(3)} (w^{(3)})^T \odot f'(z^{(2)})$$

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: $f'(x) = \begin{cases} \text{if } x > 0, f'(x) = 1 \\ \text{else } f'(x) = 0 \end{cases}$



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

$$\blacktriangleright \frac{\partial E}{\partial w_{ij}^{(2)}} = \frac{\partial E}{\partial a_i^{(2)}} \frac{\partial (a_i^{(2)})}{\partial w_{ij}^{(2)}} = \delta_i^{(2)} \frac{\partial (\sum_{j=1}^M w_{kj}^{(2)} z_j^{(1)} + b_k^{(2)})}{\partial w_{ij}^{(2)}} = \delta_i^{(2)} z_j^{(1)}$$

$$\blacktriangleright \text{综合起来, } \frac{\partial E}{\partial W^{(2)}} = \delta^{(2)} (Z^{(1)})^T$$

$$\blacktriangleright \frac{\partial E}{\partial b_i^{(2)}} = \frac{\partial E}{\partial a_i^{(2)}} \frac{\partial (a_i^{(2)})}{\partial b_i^{(2)}} = \frac{\partial E}{\partial a_i^{(2)}} \frac{\partial (\sum_{j=1}^M w_{kj}^{(2)} z_j^{(1)} + b_k^{(2)})}{\partial b_i^{(2)}} = \delta_i^{(2)} * 1 = \delta_i^{(2)}$$

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 $\frac{\partial E}{\partial w_{ij}^{(3)}}$, $\frac{\partial E}{\partial b_i^{(3)}}$ ：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 δ 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 δ 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 $W^{(2)(t+1)} = W^{(2)(t)} - \eta x^{(1)(T)} \delta^{(2)} - \eta \lambda W^{(2)(t)}$ ，此处的加入的t表示的是迭代的次数，此处的z和 δ 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 δ 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 δ 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 δ 为加了样本点维度的矩阵