2-1 只有一个隐藏层的神经网络 I

（一个训练样本）

王中雷

厦门大学王亚南经济研究院和经济学院, 2025

内容摘要

1. 回顾逻辑回归模型

2. 前向传播

3. 后向传播

4. 批量梯度下降法

直观

1. 只用一个训练样本$(\boldsymbol{x}, y)$ 展示基本概念 $(y \in \{0, 1\})$
2. 神经网络模型是特征向量$\boldsymbol{x}$ 的函数，对应的模型参数为$\boldsymbol{\theta}$
3. 利用（批量）梯度下降法得到模型参数$\boldsymbol{\theta}$ 的估计
4. 核心步骤是

$$\boldsymbol{\theta}^{(t+1)} = \boldsymbol{\theta}^{(t)} - \alpha \frac{\partial \mathcal{J}}{\partial \boldsymbol{\theta}} \left(\boldsymbol{\theta}^{(t)}\right)$$

- $\boldsymbol{\theta}^{(t)}$：当前模型参数
- 代价函数及其对参数的导数是什么呢？

直观

1．为了得到偏导数$\partial \mathcal{J}(\boldsymbol{\theta}^{(t)})/\partial \boldsymbol{\theta}$，我们需要引入

- 前向传播：基于当前模型参数，计算“激活值”以及代价函数值
- 后向传播：基于前向传播的计算结果，得到偏导数

2．我们用一个简单的例子介绍前向和后向传播的计算过程

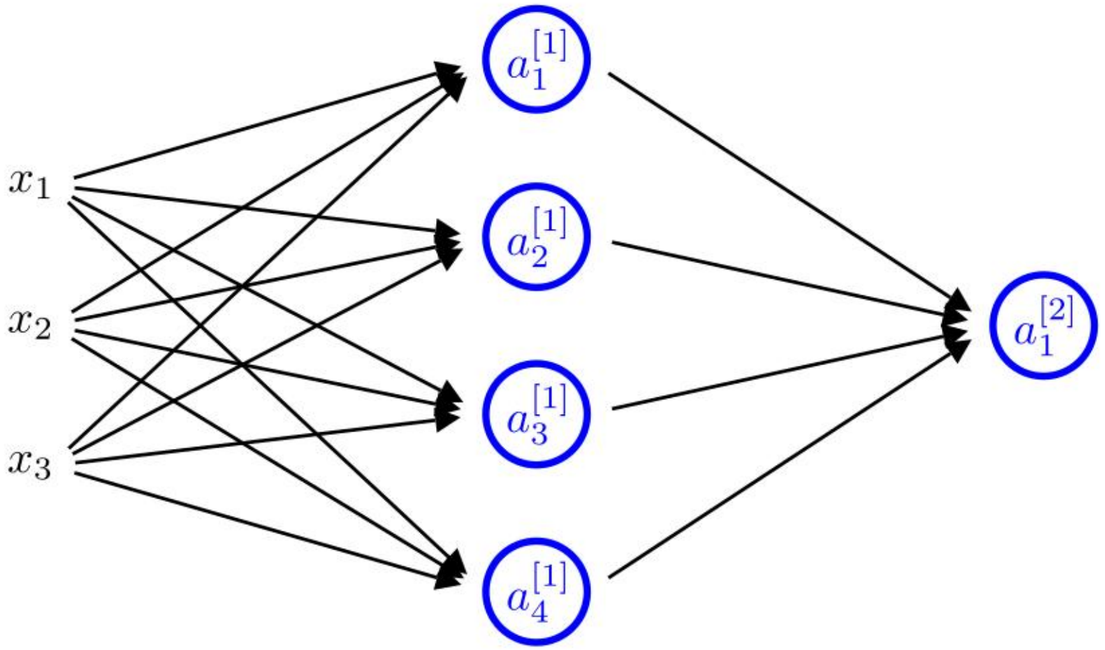
回顾逻辑回归模型

1．在处理实际问题时，这个模型过于简单

2．为什么不加入更多的“圆圈”呢?

神经网络的例子

1. 假设$\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, x_3)^{\mathrm{T}}$



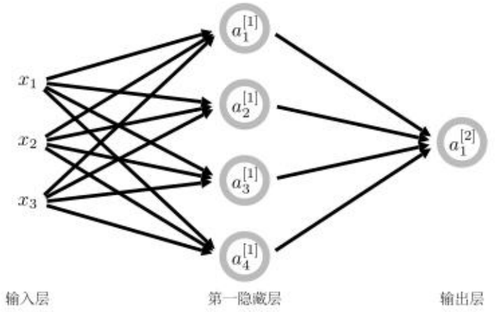
2. 每个圆圈包含如下两个运算

- 线性变换并对应两个模型参数（偏置以及权重）
- 激活变换 （非线性变换），其不对应模型参数

神经网络的例子

1．注意：

- 不同的“圆圈”对应不同模型参数，用来提取数据中的不同信息
- 我们在隐藏层中“构建”了一组“新的”特征向量
- 相比于逻辑回归模型，神经网络多了一个隐藏层用来提取更多信息
- 对于输出层而言，隐藏层可被认为是它的特征向量



计算过程　　模型参数

$$z_1^{[1]} = b_1^{[1]} + \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{w}_1^{[1]}, \quad a_1^{[1]} = \sigma(z_1^{[1]}) \qquad b_1^{[1]} \quad \boldsymbol{w}_1^{[1]}$$

$$z_2^{[1]} = b_2^{[1]} + \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{w}_2^{[1]}, \quad a_2^{[1]} = \sigma(z_2^{[1]}) \qquad b_2^{[1]} \quad \boldsymbol{w}_2^{[1]}$$

$$z_3^{[1]} = b_3^{[1]} + \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{w}_3^{[1]}, \quad a_3^{[1]} = \sigma(z_3^{[1]}) \qquad b_3^{[1]} \quad \boldsymbol{w}_3^{[1]}$$

$$z_4^{[1]} = b_4^{[1]} + \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{w}_4^{[1]}, \quad a_4^{[1]} = \sigma(z_4^{[1]}) \qquad b_4^{[1]} \quad \boldsymbol{w}_4^{[1]}$$

$$z_1^{[2]} = b_1^{[2]} + (\boldsymbol{a}^{[1]})^{\mathrm{T}} \boldsymbol{w}_1^{[2]}, \quad a_1^{[2]} = \sigma(z_1^{[2]}) \qquad b_1^{[2]} \quad \boldsymbol{w}_1^{[2]}$$

向量化

1. 记

- L：神经网络模型的层数
- $d^{[l]}$：第l 层包含的神经元个数 $(l = 0, \ldots, L)$
- $\boldsymbol{a}^{[l]} = (a_1^{[l]}, \ldots, a_{d^{[l]}}^{[l]})^{\mathrm{T}} \in \mathbb{R}^{d^{[l]} \times 1}$
- $\boldsymbol{W}^{[l]} = (\boldsymbol{w}_1^{[l]}, \ldots, \boldsymbol{w}_{d^{[l]}}^{[l]})^{\mathrm{T}} \in \mathbb{R}^{d^{[l]} \times d^{[l-1]}}$
- $\boldsymbol{b}^{[l]} = (b_1^{[l]}, \ldots, b_{d^{[l]}}^{[l]})^{\mathrm{T}} \in \mathbb{R}^{d^{[l]} \times 1}$

2. 模型参数

- $\{(\boldsymbol{b}^{[l]}, \boldsymbol{W}^{[l]}) : l = 1, \ldots, L\}$

向量化

1．对于之前考虑的例子，我们有

- $d^{[0]}=3, d^{[1]}=4, d^{[2]}=1$
- $\boldsymbol{W}^{[1]}=(\boldsymbol{w}_1^{[1]}, \boldsymbol{w}_2^{[1]}, \boldsymbol{w}_3^{[1]}, \boldsymbol{w}_4^{[1]})^{\mathrm{T}} \in \mathbb{R}^{4\times 3}, \boldsymbol{W}^{[2]}=(\boldsymbol{w}_1^{[2]})^{\mathrm{T}} \in \mathbb{R}^{1\times 4}$
- $\boldsymbol{b}^{[1]}=(b_1^{[1]}, b_2^{[1]}, b_3^{[1]}, b_4^{[1]})^{\mathrm{T}} \in \mathbb{R}^{4\times 1}, b^{[2]} \in \mathbb{R}^{1\times 1}$

前向传播

1. 前向传播利用当前参数模型计算“激活值”以及代价函数值
2. 假设当前模型参数为$\boldsymbol{b}^{[1]}, \boldsymbol{W}^{[1]}, b^{[2]}, \boldsymbol{W}^{[2]}$
3. （简化的）计算过程为

$$\boldsymbol{z}^{[1]} = \boldsymbol{b}^{[1]} + \boldsymbol{W}^{[1]}\boldsymbol{x}$$

$$\boldsymbol{a}^{[1]} = \sigma(\boldsymbol{z}^{[1]})$$

$$z^{[2]} = b^{[2]} + \boldsymbol{W}^{[2]}\boldsymbol{a}^{[1]}$$

$$a^{[2]} = \sigma(z^{[2]})$$

$$\boldsymbol{a}^{[1]} = \begin{pmatrix} \sigma(z_1^{[1]}) \\ \sigma(z_2^{[1]}) \\ \sigma(z_3^{[1]}) \\ \sigma(z_4^{[1]}) \end{pmatrix}$$

前向传播

1. 回顾：我们考虑二元回归问题：$y \in \{0, 1\}$

2. $a^{[2]}$ 是基于当前模型参数，对条件概率$P(y = 1 \mid \boldsymbol{x})$ 的估计

3. 考虑损失函数

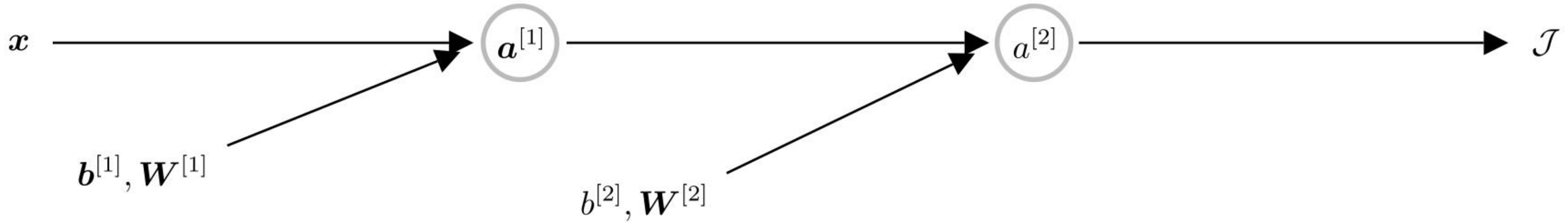
$$\mathcal{J} = \mathcal{L} = -\left\{y \log a^{[2]} + (1 - y) \log \left(1 - a^{[2]}\right)\right\}$$

4. 如果 $y \in \mathbb{R}$，那么 $a^{[2]}$ 和损失函数 $\mathcal{L}$ 的形式是什么?

5. 如果标签 y 的取值只能非负呢?

前向传播

1．将计算过程可视化



前向传播

$$\mathcal{J} = -\left\{y \log a^{[2]} + (1-y) \log\left(1-a^{[2]}\right)\right\}$$

$$z^{[1]} = b^{[1]} + W^{[1]} x$$

$$a^{[1]} = \sigma(z^{[1]})$$

$$z^{[2]} = b^{[2]} + W^{[2]} a^{[1]}$$

$$a^{[2]} = \sigma(z^{[2]})$$

后向传播

1．基于当前模型参数及前向传播计算结果，后向传播用于计算

$$\frac{\partial \mathcal{J}}{\partial \boldsymbol{b}^{[l]}}, \quad \frac{\partial \mathcal{J}}{\partial \boldsymbol{W}^{[l]}} \quad (l = 1, \ldots, L)$$

2．核心技术: 链式法则

- 记$f(\boldsymbol{x}) = g \circ h(\boldsymbol{x})$
- 我们有

$$\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{x}} = \frac{\partial g}{\partial h} \cdot \frac{\partial h}{\partial \boldsymbol{x}}$$

例子

1. 例 1：考虑 $f(\boldsymbol{x})$
   - $\boldsymbol{x} = (x_1, \ldots, x_m)^{\mathrm{T}}$：列向量
   - $f(\boldsymbol{x})$：一维
2. 那么，我们有

$$\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{x}} = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}, \ldots, \frac{\partial f}{\partial x_m} \right)^{\mathrm{T}}$$

3. $\partial f / \partial \boldsymbol{x}$ 与 $\boldsymbol{x}$ 具有相同维度

例子

1. 例 1：考虑 $f(\boldsymbol{x})$
   - $\boldsymbol{x} = (x_1, \ldots, x_m)^{\mathrm{T}}$：行向量
   - $f(\boldsymbol{x})$：一维
2. 那么，我们有

$$\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{x}} = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}, \ldots, \frac{\partial f}{\partial x_m} \right)$$

3. $\partial f / \partial \boldsymbol{x}$ 与 $\boldsymbol{x}$ 具有相同维度

例子

1. 考虑 $f(\boldsymbol{x}, by) = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}$
   - $\boldsymbol{x} = (x_1, \ldots, x_m)^{\mathrm{T}}$
   - $\boldsymbol{y} = (y_1, \ldots, y_m)^{\mathrm{T}}$
2. 那么，我们有

$$\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{x}} = \boldsymbol{y} \qquad \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{y}} = \boldsymbol{x}$$

$$\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}} = \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}} \qquad \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}} = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}$$

例子

1. 例 3：考虑 $f(\boldsymbol{X})$
   - $\boldsymbol{X} = (x_{ij}) \in \mathbb{R}^{m \times k}$：一个$m \times k$ 维矩阵
   - $f(\boldsymbol{x})$：一维
2. 那么，我们有

$$\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{X}} = \left(\frac{\partial f}{\partial x_{ij}} \right)$$

3. $\partial f / \partial \boldsymbol{X}$ 与$\boldsymbol{X}$ 具有相同维度

例子

1. 例 3：考虑 $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})$
   - $\boldsymbol{x} = (x_1, \ldots, x_m)^{\mathrm{T}}$：一个 m 维列向量
   - $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) = (f_1(\boldsymbol{x}), \ldots, f_k(\boldsymbol{x}))^{\mathrm{T}}$：一个 k 维列向量
2. 那么，我们有

$$\frac{\partial \boldsymbol{f}^{\mathrm{T}}}{\partial \boldsymbol{x}} = \left(\frac{\partial f_1}{\partial \boldsymbol{x}}, \ldots, \frac{\partial f_k}{\partial \boldsymbol{x}} \right) \in \mathbb{R}^{m \times k}$$

3. $\partial \boldsymbol{f}^{\mathrm{T}} / \partial \boldsymbol{x}$ 为一个 $m \times k$ 维矩阵
4. 我们将在本课程中使用以上定义，但不要和高等数学课中的定义相混淆

例子

1．例 1（链式法则）：考虑

$$f(\boldsymbol{x}) = g \circ \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x})$$

- $\boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}) = (h_1(\boldsymbol{x}), \ldots, h_m(\boldsymbol{x}))$
- $m \geq 2$

2．那么，我们有

$$\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{x}} = \sum_{j=1}^{m} \frac{\partial g}{\partial h_j} \frac{\partial h_j}{\partial \boldsymbol{x}}$$

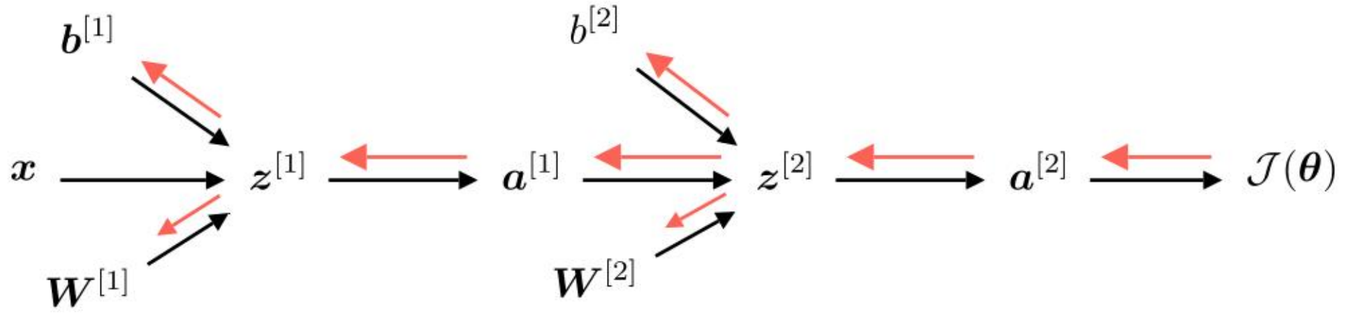
例子

1. 如果 $\boldsymbol{x}$ 是列向量，我们还有

$$\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{x}} = \sum_{j=1}^{m} \frac{\partial g}{\partial h_j} \frac{\partial h_j}{\partial \boldsymbol{x}} = \left(\frac{\partial h_1}{\partial \boldsymbol{x}}, \ldots, \frac{\partial h_m}{\partial \boldsymbol{x}} \right) \begin{pmatrix} \frac{\partial g}{\partial h_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial g}{\partial h_m} \end{pmatrix} = \frac{\partial \boldsymbol{h}^{\mathrm{T}}}{\partial \boldsymbol{x}} \frac{\partial g}{\partial \boldsymbol{h}}$$

- $\partial g / \partial \boldsymbol{h} = (\partial g / \partial h_1, \ldots, \partial g / \partial h_m)^{\mathrm{T}}$
- $\partial \boldsymbol{h}^{\mathrm{T}} / \partial \boldsymbol{x} = (\partial h_1 / \partial \boldsymbol{x}, \ldots, \partial h_m / \partial \boldsymbol{x})$

2. 即链式法则求导可被向量化
3. 然而，核心步骤是得到 $\partial h_j / \partial \boldsymbol{x}$
4. 当 $\boldsymbol{x}$ 为矩阵时，向量化失效



$$\frac{\partial \mathcal{J}(\boldsymbol{\theta})}{\partial b^{[2]}} = a^{[2]} - y \qquad \frac{\partial \mathcal{J}(\boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{W}^{[2]}} = (a^{[2]} - y)(\boldsymbol{a}^{[1]})^{\mathrm{T}}$$

$$\frac{\partial \mathcal{J}(\boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{b}^{[1]}} = (a^{[2]} - y)\boldsymbol{D}(\boldsymbol{W}^{[2]})^{\mathrm{T}} \qquad \frac{\partial \mathcal{J}(\boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{W}^{[1]}} = (a^{[2]} - y)\boldsymbol{D}(\boldsymbol{W}^{[2]})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}$$

$$\boldsymbol{D} = \mathrm{diag}(\{a_j^{[1]}(1 - a_j^{[1]}) : j = 1, \ldots, d^{[1]}\})$$

我们只需缓存$\boldsymbol{a}^{[1]}$ and $a^{[2]}$

批量梯度下降法

步骤1. 随机初始化$\boldsymbol{\theta}^{(0)}$

步骤2. 基于$\boldsymbol{\theta}^{(t)}$ 计算

$$\nabla \mathcal{J}\left(\boldsymbol{\theta}^{(t)}\right)=\frac{\partial \mathcal{J}}{\partial \boldsymbol{\theta}}\left(\boldsymbol{\theta}^{(t)}\right)$$

步骤3. 更新模型参数

$$\boldsymbol{\theta}^{(t+1)}=\boldsymbol{\theta}^{(t)}-\alpha \nabla \mathcal{J}\left(\boldsymbol{\theta}^{(t)}\right)$$

步骤4. 回到步骤 2 直至收敛