动手学习深度学习-softmax回归

对于分类问题，有硬分类和软分类之分，一般的，我们只对样本的硬性类别感兴趣，也就是属于哪一个类别；我们也希望得到软性类别，也就是属于每一个类别的概率。

一、分类问题

输入是一个2x2的灰度图像，每一个图像对应四个特征x1,x2,x3,x4，每一个图像属于类别"猫"，"鸡"，"狗"中的一个。

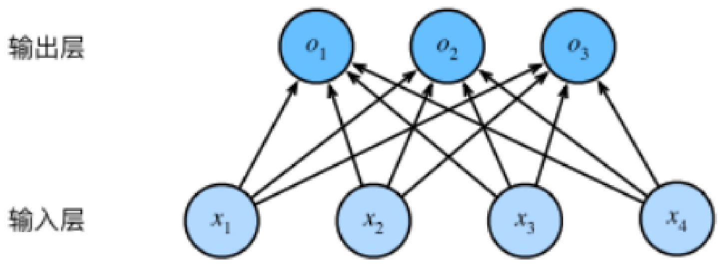
接下来，对于标签，我们使用独热编码，独热编码是一个向量，他的分量和类别一样多。类别对应的分量设置为1，其他分量设置为0。标签y是一个三维向量，其中(1,0,0)对应于"猫",(0,1,0)对应于鸡，(0,0,1)对应于狗。

二、网络架构

为了解决线性模型的分类问题，我们需要和输出一样多的仿射函数，每一个输出对应于它自己的放射函数，在本例中，我们有四个特征和三个输出类别，所以我们需要十二个标量来表示你权重（因为他有三种输出），（这就类似于组成一个非齐次线性方程组），三个标量来表示偏置，下面为每一个输入计算三个未规范化的预测（logit）,o1、o2和o3。

$$
\begin{aligned}
o_1 &= x_1 w_{11} + x_2 w_{12} + x_3 w_{13} + x_4 w_{14} + b_1,\\
o_2 &= x_1 w_{21} + x_2 w_{22} + x_3 w_{23} + x_4 w_{24} + b_2,\\
o_3 &= x_1 w_{31} + x_2 w_{32} + x_3 w_{33} + x_4 w_{34} + b_3.
\end{aligned}
$$

用神经网络图来描述这个计算过程，与线性回归一样，softmax回归也是一个单层神经网络。由于计算每一个输出o1,o2,o3都取决于所有的输入x1,x2,x3,x4(只不过每一种输出对应的权重不一样，**因为每一种输出是一种动物，而x1,x2,x3是动物的一些共有特征，但是对于不同的动物有不同的特征，这就涉及到对每一种输入特征进行加权，得到不同的输出**)，所以softmax的回归输出层也是全连接层。



我们使用一个非齐次线性方程组来表示 o = Wx + b,对于之前的线性回归模型y = Xw + b,我们可以看到线性回归模型的X是一个多行多列列的张量，每一行就是一个样本数据，每一行由若干列做成，每一列对应一个特征，而w是一个多行列向量，但是这里的softmax模型W是一个多行多列的张量，x是一个多行列向量。线性回归模型中的b只是一个标量，那么运算会涉及到广播机制，这里的softmax模型中的b是一个张量。

这样，我们将所有的权重放到一个3x4的矩阵中。对于给定数据样本的特征x,我们的输出是由权重与输入特征进行矩阵-向量乘法再加上偏置b得到的。

很显然，参数w的开销变大了。

三、全连接层的参数开销

对于具有d个输入和q个输出的全连接层，参数开销是O(dq)。

四、softmax运算

　我们希望模型的输出y可以视为某一类的概率，然后选择具有最大输出值的类别argmax y作为预测。比如y1,y2,y3分别为0.1，0.8，0.1，那么我们的预测类别就是2。

这里要注意：预测o要不要规范化，因为线性层的输出直接视为概率时存在一些问题：没有限制这些输出数字的总和是1。他们可以为负值。

softmax函数：首先对每一个没有规范化的预测求幂，这样可以保证输出非负，然后在对每一个求幂之后的结果除以他们的总和。

$$\hat{\mathbf{y}} = \mathrm{softmax}(\mathbf{o}) \quad \text{其中} \quad \hat{y}_j = \frac{\exp(o_j)}{\sum_k \exp(o_k)}$$

softmax函数并不会改变预测o之间的顺序，只会确定分配给每一个类别的概率。

$$\operatorname*{argmax}_j \hat{y}_j = \operatorname*{argmax}_j o_j.$$

然后，我们选取概率最大的类别。

五、小批量样本的矢量化

为了进行GPU并行计算，我们需要针对小批量数据执行矢量计算。我们读取了一个批量的样本X,其中特征难度（输入数量）为d，批量大小为n。此外，假设输出有q个类别，那么，**输入特征矩阵X是n x d,每一行是一个样本数据，每一列是一种特征，权重矩阵是d x q，偏置b是1 x q矩阵，**

$$\mathbf{O} = \mathbf{X}\mathbf{W} + \mathbf{b},$$

$$\hat{\mathbf{Y}} = \mathrm{softmax}(\mathbf{O}).$$

$$O = XW + b$$

$$\begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1d} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2d} \\ \vdots & & & \\ x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{nd} \end{pmatrix}_{n \times d} \times \begin{pmatrix} w_{11} & w_{21} & \cdots & w_{q1} \\ w_{12} & w_{22} & \cdots & w_{q2} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ w_{1d} & w_{2d} & \cdots & w_{qd} \end{pmatrix}_{d \times q}$$

$$+ \begin{pmatrix} b_1 & b_2 & \cdots & b_q \\ b_1 & b_2 & \cdots & b_q \\ \vdots & & & \\ b_1 & b_2 & \cdots & b_q \end{pmatrix}_{n \times q} \text{广播 } n \times q.$$

对于O的每一行，我们先对所有项进行幂运算，然后通过求和对他们进行标准化，在XW+b的求和会使用广播，小批量的未规范化预测O和输出概率Y都是形状为n x q矩阵。

六、损失函数

我们使用极大似然估计法。

6.1 对数似然

$$P(\mathbf{Y} \mid \mathbf{X}) = \prod_{i=1}^{n} P(\mathbf{y}^{(i)} \mid \mathbf{x}^{(i)}).$$

对于这个式子，我么可以理解为：在给定任意输入x的每一个类的条件概率。

按照极大似然估计法，

$$-\log P(\mathbf{Y} \mid \mathbf{X}) = \sum_{i=1}^{n} -\log P(\mathbf{y}^{(i)} \mid \mathbf{x}^{(i)}) = \sum_{i=1}^{n} l(\mathbf{y}^{(i)}, \hat{\mathbf{y}}^{(i)}),$$

其中，对于任何标签$\mathbf{y}$和模型预测$\hat{\mathbf{y}}$，损失函数为：

$$l(\mathbf{y}, \hat{\mathbf{y}}) = -\sum_{j=1}^{q} y_j \log \hat{y}_j.$$

softmax及其导数

由于softmax和相关的损失函数很常见，因此我们需要更好地理解它的计算方式。将 (3.4.3)代入损失 (3.4.8)中。利用softmax的定义，我们得到：

$$\begin{aligned} l(\mathbf{y}, \hat{\mathbf{y}}) &= -\sum_{j=1}^q y_j \log \frac{\exp(o_j)}{\sum_{k=1}^q \exp(o_k)} \\ &= \sum_{j=1}^q y_j \log \sum_{k=1}^q \exp(o_k) - \sum_{j=1}^q y_j o_j \\ &= \log \sum_{k=1}^q \exp(o_k) - \sum_{j=1}^q y_j o_j. \end{aligned} \tag{3.4.9}$$

考虑相对于任何未规范化的预测o_j的导数，我们得到：

$$\partial_{o_j} l(\mathbf{y}, \hat{\mathbf{y}}) = \frac{\exp(o_j)}{\sum_{k=1}^q \exp(o_k)} - y_j = \mathrm{softmax}(\mathbf{o})_j - y_j. \tag{3.4.10}$$

可以看到导数是softmax模型分配的概率与实际发生的情况（独热标签向量表示）之间的差异。

七、模型预测和评估

训练完softmax回归模型之后，给出任何样本特征，我们可以预测每一个输出类别的概率。通常我破门使用预测概率最高的类别作为输出类别。如果预测与实际类别一致，那么预测就是正确的。