日拱一卒

知者行之始，行者知之成。 君子务本，本立而道生。

乍一看到某个问题，你会觉得很简单，其实你并没有理解其复杂性。当你把问题搞清楚之后，又会发现真的很复杂，于是你就拿出一套复杂的方案来。实际上，你的工作只做了一半，大多数人也都会到此为止……。但是，真正伟大的人还会继续向前，直至找到问题的关键和深层次原因，然后再拿出一个优雅的、堪称完美的有效方案。

—— from 乔布斯

直观理解为什么分类问题用交叉熵损失而不用均方误差损失?

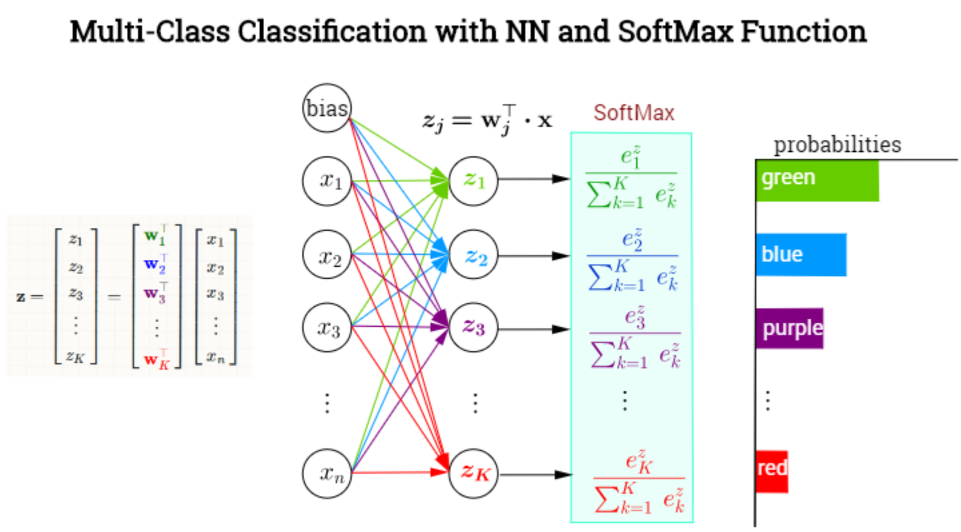
2019-12-12 22:26 shine-lee 5391 1 编辑 收藏 举报
分类： 机器学习， 深度学习基础

目录

博客：blog.shinelee.me | 博客园 | CSDN

交叉熵损失与均方误差损失

常规分类网络最后的softmax层如下图所示，传统机器学习方法以此类比，



一共有K类，令网络的输出为$[\hat{y}_1, \dots, \hat{y}_K]$，对应每个类别的概率，令label为 $[y_1, \dots, y_K]$。对某个属于p类的样本，其label中$y_p = 1$，$y_1, \dots, y_{p-1}, y_{p+1}, \dots, y_K$均为0。

对这个样本， **交叉熵（cross entropy）损失** 为

$$\begin{aligned} L &= -(y_1 \log \hat{y}_1 + \dots + y_K \log \hat{y}_K) \\ &= -y_p \log \hat{y}_p \\ &= -\log \hat{y}_p \end{aligned}$$

均方误差损失（mean squared error，MSE） 为

$$
\begin{aligned}
L &= (y_1-\hat{y}_1)^2+\cdots+(y_K-\hat{y}_K)^2 \\
&= (1-\hat{y}_p)^2+(\hat{y}_1^2+\cdots+\hat{y}_{p-1}^2+\hat{y}_{p+1}^2+\cdots+\hat{y}_K^2)
\end{aligned}
$$

则m个样本的损失为

$$
\ell = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} L_i
$$

对比交叉熵损失与均方误差损失，只看单个样本的损失即可，下面从两个角度进行分析。

损失函数角度

损失函数是网络学习的指挥棒，它引导着网络学习的方向——能让损失函数变小的参数就是好参数。

所以，**损失函数的选择和设计要能表达你希望模型具有的性质与倾向。**

对比交叉熵和均方误差损失，可以发现，两者均在$\hat{y}=y=1$时取得最小值0，但在实践中$\hat{y}_p$只会趋近于1而不是恰好等于1，在$\hat{y}_p<1$的情况下，

- **交叉熵** 只与label类别有关，$\hat{y}_p$越趋近于1越好
- **均方误差** 不仅与$\hat{y}_p$有关，还与其他项有关，它希望$\hat{y}_1,\dots,\hat{y}_{p-1},\hat{y}_{p+1},\dots,\hat{y}_K$越平均越好，即在$\frac{1-\hat{y}_p}{K-1}$时取得最小值

分类问题中，对于类别之间的相关性，我们缺乏先验。

虽然我们知道，与“狗”相比，“猫”和“老虎”之间的相似度更高，但是这种关系在样本标记之初是难以量化的，所以label都是one hot。

在这个前提下，均方误差损失可能会给出错误的指示，比如猫、老虎、狗的3分类问题，label为$[1,0,0]$，在均方误差看来，预测为$[0.8,0.1,0.1]$要比$[0.8,0.15,0.05]$要好，即认为 **平均总比有倾向性要好，但这有悖我们的常识**。

而 **对交叉熵损失，既然类别间复杂的相似度矩阵是难以量化的，索性只能关注样本所属的类别**，只要$\hat{y}_p$越接近于1就好，这显示是更合理的。

softmax反向传播角度

softmax的作用是将$(-\infty,+\infty)$的几个实数映射到$(0,1)$之间且之和为1，以获得某种概率解释。

令softmax函数的输入为z，输出为$\hat{y}$，对结点p有，

$$
\hat{y}_p = \frac{e^{z_p}}{\sum_{k=1}^{K} e^{z_k}}
$$

$\hat{y}_p$不仅与z_p有关，还与$\{z_k|k\neq p\}$有关，这里仅看z_p，则有

$$
\frac{\partial \hat{y}_p}{\partial z_p} = \hat{y}_p(1-\hat{y}_p)
$$

$\hat{y}_p$为正确分类的概率，为0时表示分类完全错误，越接近于1表示越正确。根据链式法则，按理来讲，对与z_p相连的权重，损失函数的偏导会含有$\hat{y}_p(1-\hat{y}_p)$这一因子项，$\hat{y}_p=0$时 **分类错误，但偏导为0，权重不会更新，这显然不对 —— 分类越错误越需要对权重进行更新**。

对 **交叉熵损失**，

$$
\frac{\partial L}{\partial \hat{y}_p} = -\frac{1}{\hat{y}_p}
$$

则有

$$
\frac{\partial L}{\partial \hat{z}_p} = \frac{\partial L}{\partial \hat{y}_p}\cdot\frac{\partial \hat{y}_p}{\partial z_p} = \hat{y}_p - 1
$$

恰好将$\hat{y}_p(1-\hat{y}_p)$中的$\hat{y}_p$消掉，避免了上述情形的发生，且$\hat{y}_p$越接近于1，偏导越接近于0，即分类越正确越不需要更新权重，这与我们的期望相符。

而对 **均方误差损失** ，

$$\frac{\partial L}{\partial \hat{y}_p} = -2(1-\hat{y}_p) = 2(\hat{y}_p - 1)$$

则有，

$$\frac{\partial L}{\partial \hat{z}_p} = \frac{\partial L}{\partial \hat{y}_p} \cdot \frac{\partial \hat{y}_p}{\partial z_p} = -2\hat{y}_p(1-\hat{y}_p)^2$$

显然，仍会发生上面所说的情况——$\hat{y}_p = 0$，**分类错误，但不更新权重** 。

综上，对分类问题而言，无论从损失函数角度还是softmax反向传播角度，交叉熵都比均方误差要好。

参考

- Loss Functions
- Why You Should Use Cross-Entropy Error Instead Of Classification Error Or Mean Squared Error For Neural Network Classifier Training

« 上一篇： Batch Normalization详解
» 下一篇： 远程桌面MATLAB启动失败问题解决

导航目录

· 警惕概念营销：RISC-V能否成为中国芯片弯道超车的希望？
» 更多新闻...

导航目录