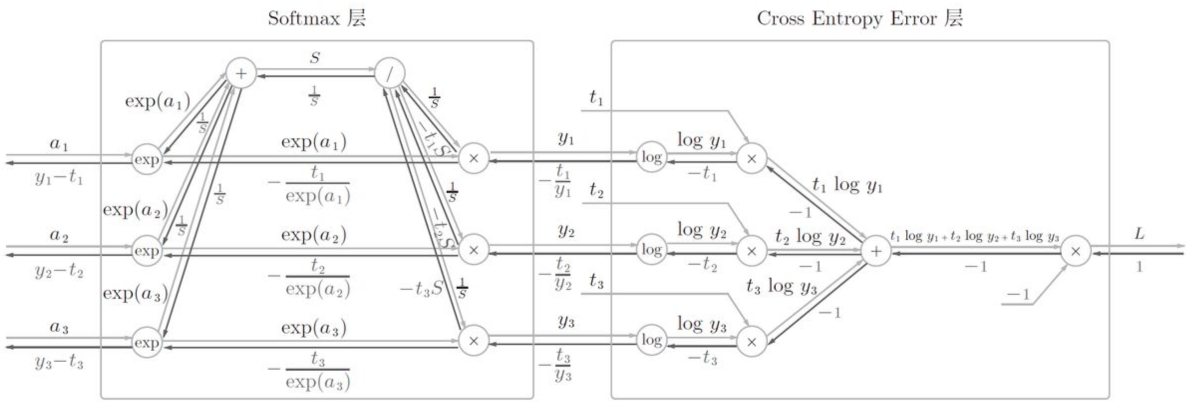
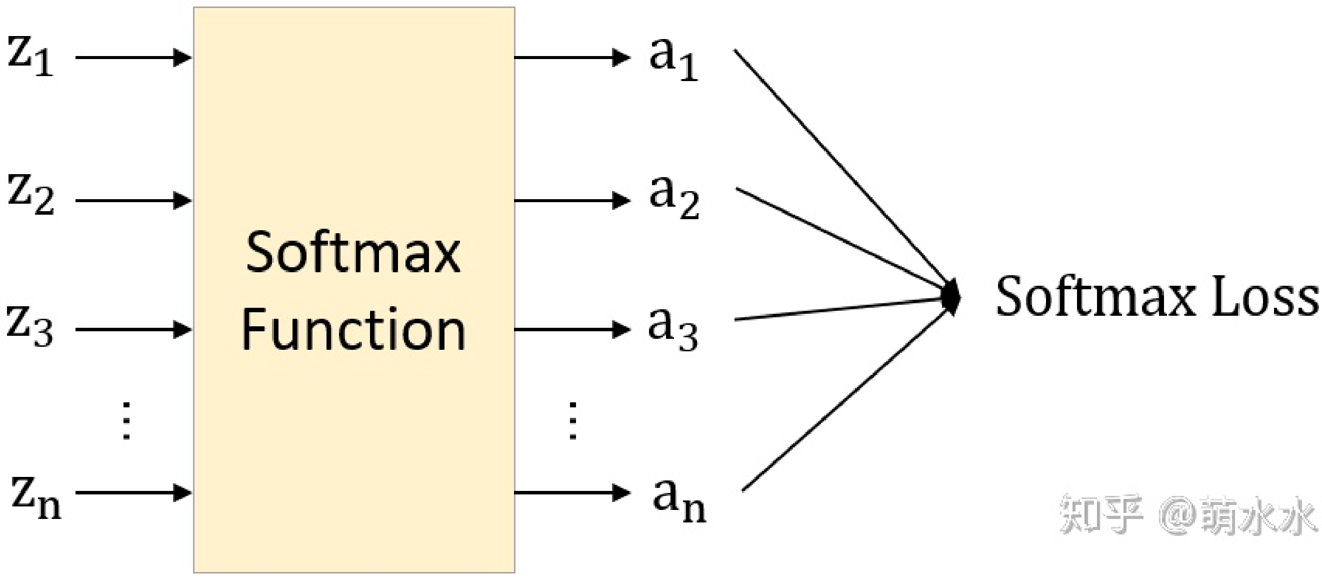


15分钟搞定Softmax Loss求导

萌水水
只爱干货的萌水水

求softmax loss过程如下图所示：



Softmax Loss 计算过程

符号定义如下：

1. 输入为z向量， $z=[z_1, z_2, z_3, .. z_n]$ ，维度为（1，n）

2. 经过softmax函数， $a_i = \frac{e^{z_i}}{\Sigma_{k=1}^{n} e^{z_k}}$

3. Softmax Loss损失函数定义为L， $L=-\Sigma_{i=1}^{n}y_iln(a_i)$ ，L是一个标量，维度为（1,1）

其中y向量为模型的Label，维度也是（1，n），为已知量，一般为onehot形式。

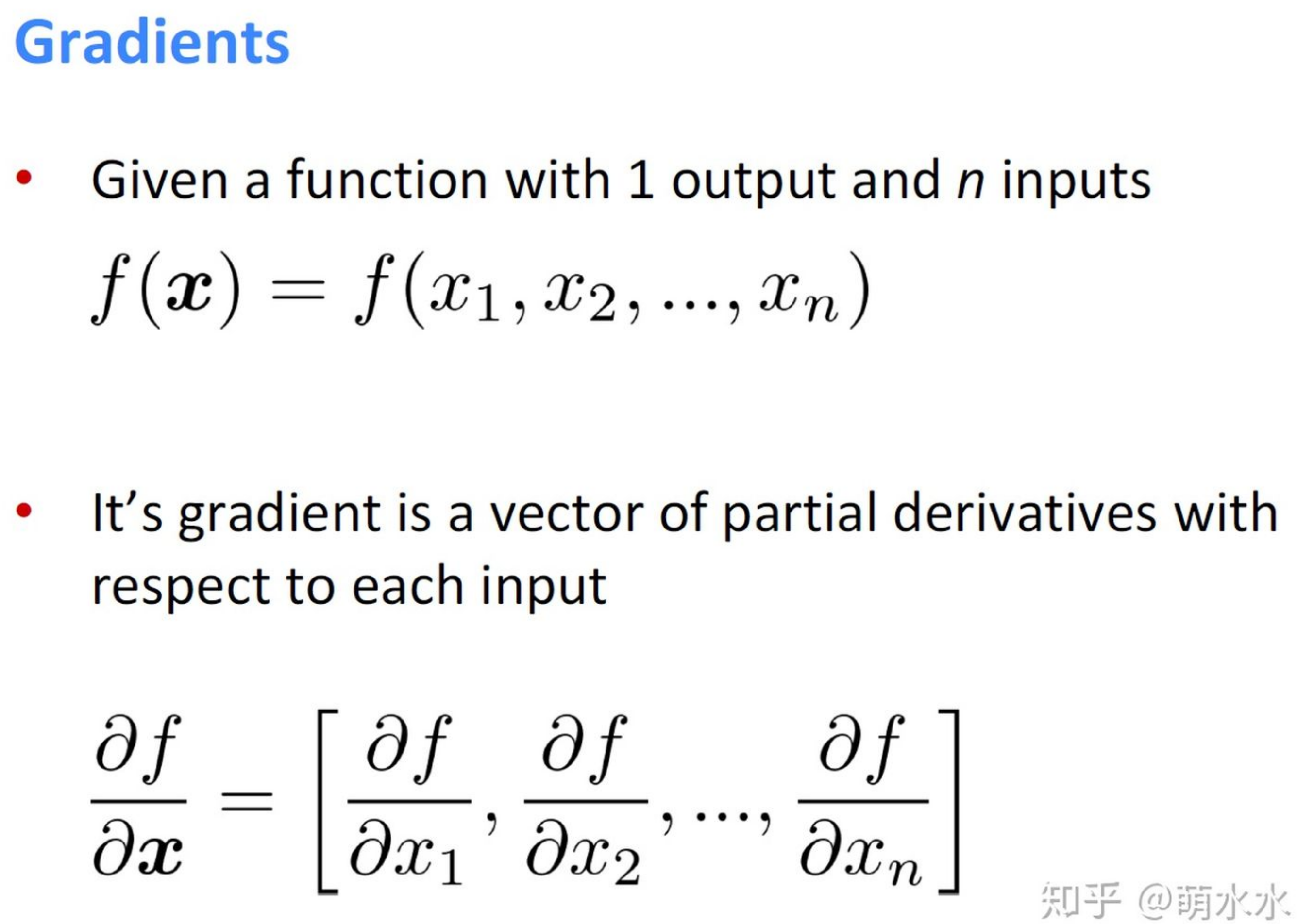
我们假设第 j 个类别是正确的，则 $y=[0,0,...1,..0]$ ，只有 $y_j=1$ ，其余 $y_i=0$

那么 $L=-y_jln(a_j)=-ln(a_j)$

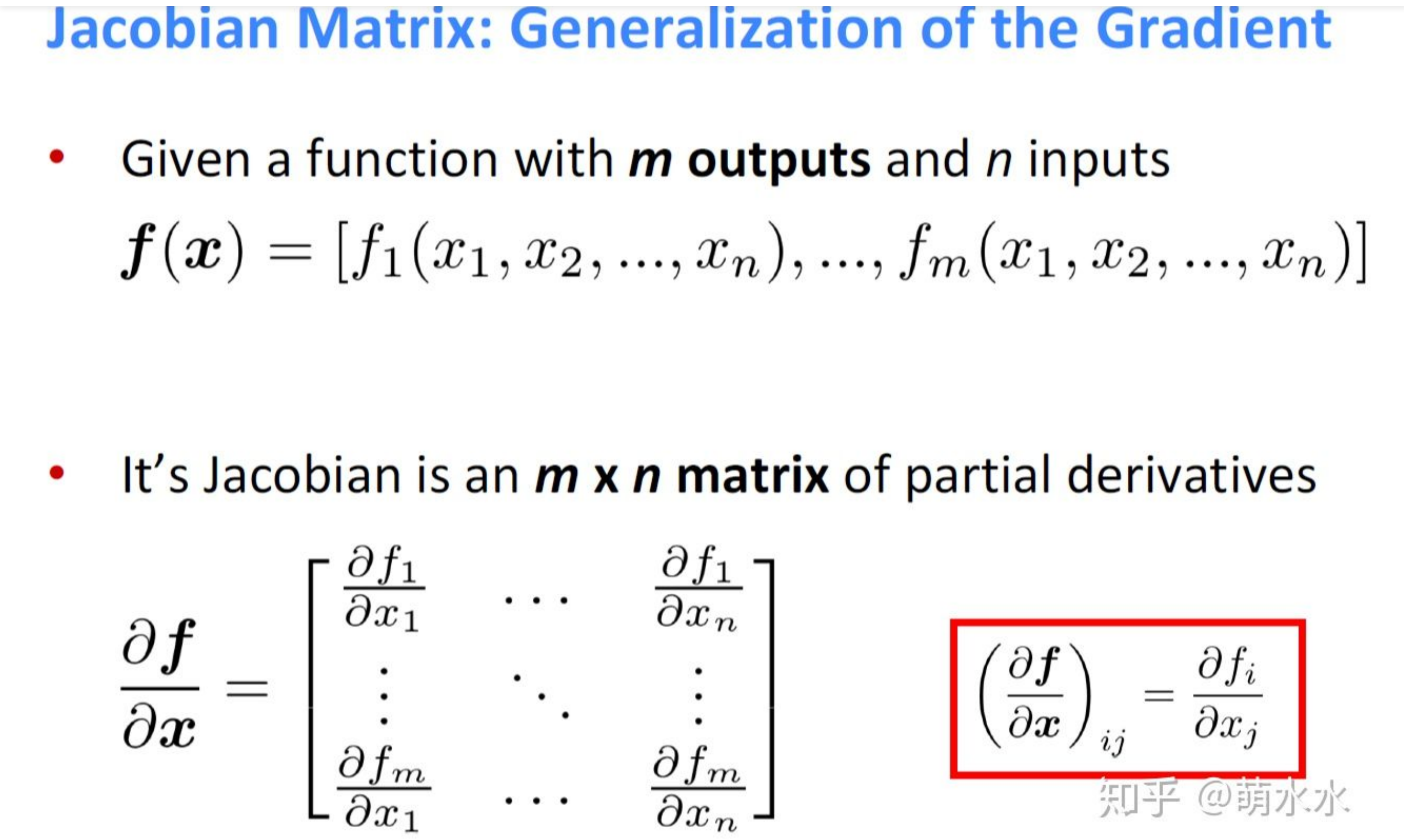
我们的**目标**是求 标量 L 对向量 $\boldsymbol{z}$ 的导数 $\frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{z}}$ 。

由链式法则， $\frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{z}}=\frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{a}}*\frac{\partial \boldsymbol{a}}{\partial \boldsymbol{z}}$ ，其中a和z均为维度为（1，n）的向量。

L为标量，它对向量a求导。标量对向量求导，见CS224N Lecture 3的一页ppt：



可知，标量对向量求导，维度不变，也即 $\frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{z}}$ 和 $\frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{a}}$ 维度都应为（1，n）。



其中f对应的就是softmax函数，x对应的为z。可知向量a对向量z求导是一个Jacobian矩阵，维度为（n，n）。

$\frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{a}}$ 维度为（1，n），$\frac{\partial \boldsymbol{a}}{\partial \boldsymbol{z}}$ 维度为（n，n），$\frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{z}} = \frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{a}} * \frac{\partial \boldsymbol{a}}{\partial \boldsymbol{z}}$ 。由矩阵乘法，维度（1，n）*（n, n） = (1，n)。$\frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{z}}$ 的维度为（1，n），这个是合理的。

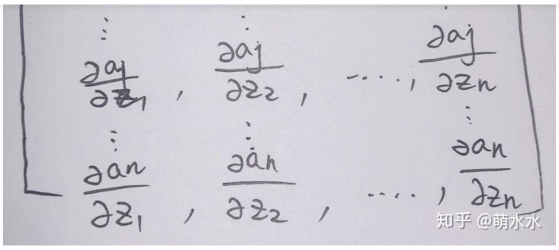
1. 求 $\frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{a}}$

由 $L = -y_j ln(a_j) = -ln(a_j)$ ，可知最终的Loss只跟 a_j 有关。

$$\frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{a}} = [0, 0, 0, \ldots, -\frac{1}{a_j}, \ldots, 0]$$

2. 求 $\frac{\partial \boldsymbol{a}}{\partial \boldsymbol{z}}$

$\boldsymbol{a}$ 是一个向量，$\boldsymbol{z}$ 也是一个向量，则 $\frac{\partial \boldsymbol{a}}{\partial \boldsymbol{z}}$ 是一个Jacobian矩阵，类似这样：



可以发现其实Jacobian矩阵的每一行对应着 $\frac{\partial a_i}{\partial \boldsymbol{z}}$ 。

由于 $\frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{a}}$ 只有第j列不为0，由矩阵乘法，其实我们只要求 $\frac{\partial \boldsymbol{a}}{\partial \boldsymbol{z}}$ 的第j行，也即 $\frac{\partial a_j}{\partial \boldsymbol{z}}$ ，
$\frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{z}} = -\frac{1}{a_j} * \frac{\partial a_j}{\partial \boldsymbol{z}}$ ，其中 $a_j = \frac{e^{z_j}}{\Sigma_{k=1}^{n} e^{z_k}}$ 。

（1）当 $i \neq j$

$$\frac{\partial a_j}{\partial z_i} = \frac{0 - e^{z_j} e^{z_i}}{(\sum_k^n e^{z_k})^2} = -a_j a_i$$

$$\frac{\partial L}{\partial z_i} = -a_j a_i * -\frac{1}{a_j} = a_i$$

（2）当 $i = j$

$$\frac{\partial a_j}{\partial z_j} = \frac{e^{z_j} \sum_k^n e^{z_k} - e^{z_j} e^{z_j}}{(\sum_k^n e^{z_k})^2} = a_j - a_j^2$$

$$\frac{\partial L}{\partial z_j} = (a_j - a_j^2) * -\frac{1}{a_j} = a_j - 1$$

所以， $\frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{z}} = [a_1, a_2, \ldots, a_j - 1, \ldots a_n] = \boldsymbol{a} - \boldsymbol{y}$ 。

Softmax Cross Entropy Loss的求导结果非常优雅，就等于预测值与Label的差。

下面这段话挺好：

> 使用交叉熵误差作为softmax 函数的损失函数后，反向传播得到（y1 − t1, y2 − t2, y3 − t3）这样“ 漂亮”的结果。实际上，这样“漂亮”的结果并不是偶然的，而是为了得到这样的结果，特意设计了交叉熵误差函数。回归问题中输出层使用“恒等函数”，损失函数使用“平方和误差”，也是出于同样的理由（3.5 节）。也就是说，使用“平方和误差”作为“恒等函数”的损失函数，反向传播才能得到（y1 −t1, y2 − t2, y3 − t3）这样“漂亮”的结果。

引用：

1. Stanford CS224N web.stanford.edu/class/...
2. 深度学习入门：基于Python的理论与实现

编辑于 2020-02-26

写下你的评论...

一条咸鱼 2020-02-25

loss是不是少了一个负号

1

萌水水 (作者) 回复 一条咸鱼 2020-02-26

说的对，已全部修改。

赞

GraphSAGE 07-17

预测值与Label的差，这个真好记，和LR形势类似，不过LR多一个x

赞

阿乐哉 07-01

看了那么多材料，就这一篇讲明白了

赞

骰子 06-28

绝绝子！给大佬点个赞！

赞

范虚 02-19

感谢，讲得非常清晰

赞

子光 01-16

非常好的文章，解答了我困惑许久的问题