# softmax回归的从零开始实现

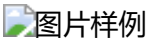
softmax回归是**分类问题**重要的基础，因此(**应当掌握实现softmax回归的细节**)。

本节将使用Fashion-MNIST数据集， 并设置数据迭代器的批量大小为256。

Fashion-MNIST数据集包含60000张训练图像和对应Label； 10000张测试图像和对应Label； 10个类别； 每张图像$28 \times 28$的分辨率

| Label | Description |
|---|---|
| 0 | T恤（T-shirt/top） |
| 1 | 裤子（Trouser） |
| 2 | 套头衫（Pullover） |
| 3 | 连衣裙（Dress） |
| 4 | 外套（Coat） |
| 5 | 凉鞋（Sandal） |
| 6 | 衬衫（Shirt） |
| 7 | 运动鞋（Sneaker） |
| 8 | 包（Bag） |
| 9 | 靴子（Ankle boot） |

## 1. 下载Fashion-MNIST数据集

 图片样例

In [1]:

```
import torch
from IPython import display
from d2l import torch as d2l
```

In [2]:

```
batch_size = 256
train_iter, test_iter = d2l.load_data_fashion_mnist(batch_size)
```

## 2. 初始化模型参数

和线性回归一样，每个样本都将用固定长度的向量表示。

原始数据集中的每个图像样本的尺寸都是$28 \times 28$。 **展平每个图像，把每个样本看作长度为784（=$28 \times 28$）的向量。** 本例中，把每个像素看作一个特征。

在softmax回归中，网络的输出维度与任务类别一样多。 (**数据集有10个类别，所以网络输出维度为10**)。 因此，将权重$\mathbf{w}$构造成一个$784 \times 10$的矩阵， 偏置$\mathbf{b}$将构成一个$1 \times 10$的行向量。 与线性回归一样，使用正态分布初始化权重$\mathbf{w}$，偏置$\mathbf{b}$初始化为0。

In [3]:

```
num_inputs = 784
num_outputs = 10

W = torch.normal(0, 0.01, size=(num_inputs, num_outputs), requires_grad=True)
b = torch.zeros(num_outputs, requires_grad=True)
```

# 3. 定义softmax操作

sum 运算符如何沿着张量中的特定维度工作?

1. **给定一个矩阵 X，可以对它的所有元素求和**（默认情况下）。
2. 也可以只求同一个轴上的元素，即同一列（轴0）或同一行（轴1）。

如果 X 是一个形状为 (2, 3) 的张量，对列进行求和， 则结果将是一个具有形状 (3,) 的向量。 **(注意：消失了一个轴)**

当调用 sum 运算符时，可以指定**保持张量的轴数**，而不折叠求和的维度。 这将产生一个具有形状 (1, 3) 的二维张量。

In [4]:

```
X = torch.tensor([[1.0, 2.0, 3.0], [4.0, 5.0, 6.0]])
X.sum(0, keepdim=True), X.sum(1, keepdim=True)
```

Out[4]:

```
(tensor([[5., 7., 9.]]),
 tensor([[ 6.],
         [15.]]))
```

**实现softmax**的三个步骤:

1. 对每个项求幂（使用 exp ）；
2. 对每一行求和（小批量中每个样本是一行），得到每个样本的规范化常数;
3. 将每一行除以其规范化常数，确保结果的和为1。

回顾表达式:

$$\mathrm{softmax}(\mathbf{X})_{ij} = \frac{\exp(\mathbf{X}_{ij})}{\sum_k \exp(\mathbf{X}_{ik})}.$$

In [5]:

```
def softmax(X):
    X_exp = torch.exp(X)
    partition = X_exp.sum(1, keepdim=True)
#     print('partition shape:', partition.shape)
    return X_exp / partition  # 这里应用了广播机制
```

对于任何随机输入 X， **softmax() 将每个元素变成一个非负数。 依据概率原理，每行总和为1。**

In [6]:

```
X = torch.normal(0, 1, (2, 5))
X_prob = softmax(X)
X, X_prob, X_prob.sum(1)
```

Out[6]:

```
(tensor([[-0.7044, -0.9903, -0.1389,  1.0029, -0.0408],
         [ 0.4693,  1.9423,  0.7361, -0.2441,  0.5615]]),
 tensor([[0.0912, 0.0685, 0.1605, 0.5028, 0.1770],
         [0.1211, 0.5285, 0.1582, 0.0594, 0.1329]]),
 tensor([1., 1.]))
```

注意，虽然这在数学上看起来是正确的，但我们在代码实现中有点草率。 矩阵中的非常大或非常小的元素在 `softmax()` 的指数运算中，可能造成数值上溢或下溢，但本例中没有采取措施来防止这点。

# 4. 定义模型

**实现softmax回归模型。** 下面的代码定义了，根据输入，如何将其通过网络映射到输出。

注意，将数据传递到模型之前，先使用 `reshape` 函数将每张原始图像展平为向量。例如，将$28 \times 28$的向量展平为784。

In [7]:

```
def net(X):
    return softmax(torch.matmul(X.reshape((-1, W.shape[0])), W) + b)
```

# 5. 定义损失函数

实现**交叉熵（Cross-Entrophy）损失**函数，简称CE Loss。 它是深度学习中最常见的损失函数。

交叉熵采用真实标签的预测概率的负对数似然。 不要使用for循环来实现其中的迭代计算（低效）， 而是通过矩阵级运算提高计算效率。

**创建数据样本的估计值 `y_hat` ，它包含2个样本在3个类别的预测概率， 以及它们对应的标签 `y` 。** 假设第一个样本中，第一类是正确的预测； 而在第二个样本中，第三类是正确的预测。 **使用 `y` 作为 `y_hat` 中概率的索引**， 选择第一个样本中第一个类的概率，和第二个样本中第三个类的概率。

In [8]:

```
#第一个样本的正确类别为0，第二个样本的正确类别为2
y = torch.tensor([0, 2])
#第一个样本的关于三个类别的预测概率为[[0.1, 0.3, 0.6]，第二个样本为[0.3, 0.2, 0.5]]
y_hat = torch.tensor([[0.1, 0.3, 0.6], [0.3, 0.2, 0.5]])
#y_hat[[0, 1], y]为两个样本对于各自正确类别的预测概率，注意索引方式
y_hat[[0, 1], y],y_hat[[0, 0], y],y_hat[[1, 0], y]
```

Out[8]:

```
(tensor([0.1000, 0.5000]), tensor([0.1000, 0.6000]), tensor([0.3000, 0.600
0]))
```

只需一行代码就可以**实现交叉熵损失函数。**

$$\mathcal{L}_{CE}(y, \hat{y}) = -\sum_{i=1}^{n}(y_i \log(\hat{y}_i))$$

$$\mathcal{L}_{CE}(y, \hat{y}) = -\log(\hat{y}_y)$$

In [9]:

```
def cross_entropy(y_hat, y):
    #计算每个样本在正确类别上的预测概率，并求Log
    return - torch.log(y_hat[range(len(y_hat)), y])
cross_entropy(y_hat, y)
```

Out[9]:

```
tensor([2.3026, 0.6931])
```

# 6. 求分类精度

给定预测概率分布 y_hat ，线性网络必须输出硬预测（hard prediction）， 通常选择预测概率最高的类作为网络的输出。 例如：电子邮件中将邮件分类为“Primary（主要邮件）”、 “Social（社交邮件）”、“Updates（更新邮件）”或“Forums（论坛邮件）”。 邮箱软件做分类时可能在内部估计概率，但最终它必须在类中选择一个。

当预测结果与标签分类 y 一致时，即是正确的。 **分类精度即正确预测数量与总预测数量之比。** 直接对精度进行优化很困难（因为精度的计算不可导）， 但精度通常是我们最关心的性能衡量标准，在训练分类器时几乎总会关注它。

为了计算精度，执行以下操作。

1. 如果 y_hat 是二维矩阵，假定第一个维度对应每个样本，第二个维度存储每个类的预测分数。 使用 argmax 获得每行（第二个维度）中最大值元素的索引，以此作为预测类别。
2. **将预测类别与真实类别 y 的各元素进行比较。** 由于等式运算符“ == ”对数据类型很敏感， 因此我们将 y_hat 的数据类型转换为与 y 的数据类型一致。 结果是一个包含0（错）和1（对）的张量。
3. 最后，求和会得到正确预测的数量。

In [10]:

```
def accuracy(y_hat, y):  #@save
    """计算预测正确的数量"""
#     print("y_hat的轴数量:",len(y_hat.shape),"    y_hat类别数量:", y_hat.shape[1])
    if len(y_hat.shape) > 1 and y_hat.shape[1] > 1:
        y_hat = y_hat.argmax(axis=1)
    cmp = y_hat.type(y.dtype) == y
    return float(cmp.type(y.dtype).sum())
```

我们将继续使用之前定义的变量 y_hat 和 y 分别作为预测的概率分布和标签。 可以看到，第一个样本的预测类别是2（该行的最大元素为0.6，索引为2），这与实际标签0不一致。 第二个样本的预测类别是2（该行的最大元素为0.5，索引为2），这与实际标签2一致。 因此，这两个样本的分类精度率为0.5。

In [11]:

```
print(y_hat, y)
accuracy(y_hat, y) / len(y)
```

```
tensor([[0.1000, 0.3000, 0.6000],
        [0.3000, 0.2000, 0.5000]]) tensor([0, 2])
```

Out[11]:

```
0.5
```

同样，对于任意数据迭代器 `data_iter` 可访问的数据集， **可以评估在任意模型 `net` 的精度。**

In [12]:

```
def evaluate_accuracy(net, data_iter):  #@save
    """计算在指定数据集上模型的精度"""
    if isinstance(net, torch.nn.Module):
        net.eval()  # 将模型设置为评估模式
    metric = Accumulator(2)  # 正确预测数、预测总数
    with torch.no_grad():
        for X, y in data_iter:
            metric.add(accuracy(net(X), y), y.numel())
    return metric[0] / metric[1]
```

这里定义一个实用程序类 `Accumulator` ，用于对多个变量进行累加。 在上面的 `evaluate_accuracy` 函数中， 我们在( **`Accumulator` 实例中创建了2个变量， 分别用于存储正确预测的数量和预测的总数量**)。 当我们遍历数据集时，两者都将随着时间的推移而累加。

In [13]:

```
class Accumulator:  #@save
    """在n个变量上累加"""
    def __init__(self, n):
        self.data = [0.0] * n

    def add(self, *args):
        self.data = [a + float(b) for a, b in zip(self.data, args)]

    def reset(self):
        self.data = [0.0] * len(self.data)

    def __getitem__(self, idx):
        return self.data[idx]
```

由于我们使用随机权重初始化 `net` 模型， 因此该模型的精度应接近于随机猜测。 例如在有10个类别情况下的精度为0.1。

In [14]:

```
evaluate_accuracy(net, test_iter)
```

Out[14]:

```
0.171
```

# 7. 训练

[**softmax回归的训练**]过程代码和线性回归非常相似。 在这里，重构训练过程的实现以使其可重复使用。 首先，定义一个函数来训练一个迭代周期。 请注意， `updater` 是更新模型参数的常用函数，它接受批量大小作为参数。 它可以是 `d2l.sgd` 函数，也可以是框架的内置优化函数。

In [15]:

```
def train_epoch_ch3(net, train_iter, loss, updater):  #@save
    """训练模型一个迭代周期"""
    # 将模型设置为训练模式
    if isinstance(net, torch.nn.Module):
        net.train()
    # 训练损失总和、训练准确度总和、样本数
    metric = Accumulator(3)
    for X, y in train_iter:
        # 计算梯度并更新参数
        y_hat = net(X)
        l = loss(y_hat, y)
        if isinstance(updater, torch.optim.Optimizer):
            # 使用PyTorch内置的优化器和损失函数
            updater.zero_grad()
            l.mean().backward()
            updater.step()
        else:
            # 使用定制的优化器和损失函数
            l.sum().backward()
            updater(X.shape[0])
        metric.add(float(l.sum()), accuracy(y_hat, y), y.numel())
    # 返回训练损失和训练精度
    return metric[0] / metric[2], metric[1] / metric[2]
```

在展示训练函数的实现之前，**定义一个在动画中绘制数据的实用程序类** `Animator` ， 它能够简化部分代码。

In [16]:

```
class Animator:  #@save
    """在动画中绘制数据"""
    def __init__(self, xlabel=None, ylabel=None, legend=None, xlim=None,
                 ylim=None, xscale='linear', yscale='linear',
                 fmts=('-', 'm--', 'g-.', 'r:'), nrows=1, ncols=1,
                 figsize=(3.5, 2.5)):
        # 增量地绘制多条线
        if legend is None:
            legend = []
        d2l.use_svg_display()
        self.fig, self.axes = d2l.plt.subplots(nrows, ncols, figsize=figsize)
        if nrows * ncols == 1:
            self.axes = [self.axes, ]
        # 使用lambda函数捕获参数
        self.config_axes = lambda: d2l.set_axes(
            self.axes[0], xlabel, ylabel, xlim, ylim, xscale, yscale, legend)
        self.X, self.Y, self.fmts = None, None, fmts

    def add(self, x, y):
        # 向图表中添加多个数据点
        if not hasattr(y, "__len__"):
            y = [y]
        n = len(y)
        if not hasattr(x, "__len__"):
            x = [x] * n
        if not self.X:
            self.X = [[] for _ in range(n)]
        if not self.Y:
            self.Y = [[] for _ in range(n)]
        for i, (a, b) in enumerate(zip(x, y)):
            if a is not None and b is not None:
                self.X[i].append(a)
                self.Y[i].append(b)
        self.axes[0].cla()
        for x, y, fmt in zip(self.X, self.Y, self.fmts):
            self.axes[0].plot(x, y, fmt)
        self.config_axes()
        display.display(self.fig)
        display.clear_output(wait=True)
```

接下来实现一个**训练函数**， 它会在 `train_iter` 访问到的训练数据集上训练一个模型 `net` 。 该训练函数将会运行多个迭代周期（由 `num_epochs` 指定）。 在每个迭代周期结束时，利用 `test_iter` 访问到的测试数据集对模型进行评估。 利用 `Animator` 类来可视化训练进度。

In [17]:

```
def train_ch3(net, train_iter, test_iter, loss, num_epochs, updater):  #@save
    """训练模型"""
    animator = Animator(xlabel='epoch', xlim=[1, num_epochs], ylim=[0.3, 0.9],
                        legend=['train loss', 'train acc', 'test acc'])
    for epoch in range(num_epochs):
        train_metrics = train_epoch_ch3(net, train_iter, loss, updater)
        test_acc = evaluate_accuracy(net, test_iter)
        animator.add(epoch + 1, train_metrics + (test_acc,))
    train_loss, train_acc = train_metrics
    assert train_loss < 0.5, train_loss
    assert train_acc <= 1 and train_acc > 0.7, train_acc
    assert test_acc <= 1 and test_acc > 0.7, test_acc
```

作为一个从零开始的实现，使用**小批量随机梯度下降来优化模型的损失函数**，设置学习率为0.1。

In [18]:

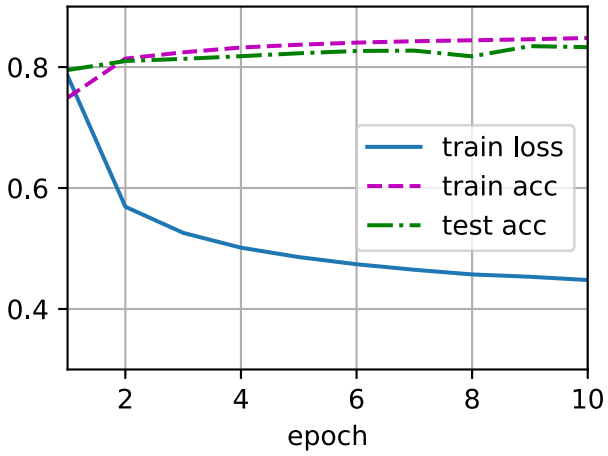
```
lr = 0.1

def updater(batch_size):
    return d2l.sgd([W, b], lr, batch_size)
```

现在，**训练模型10个迭代周期。** 迭代周期（ num_epochs ）和学习率（ lr ）都是可调节的超参数。 通过更改它们的值，可以提高模型的分类精度。

In [19]:

```
num_epochs = 10
train_ch3(net, train_iter, test_iter, cross_entropy, num_epochs, updater)
```



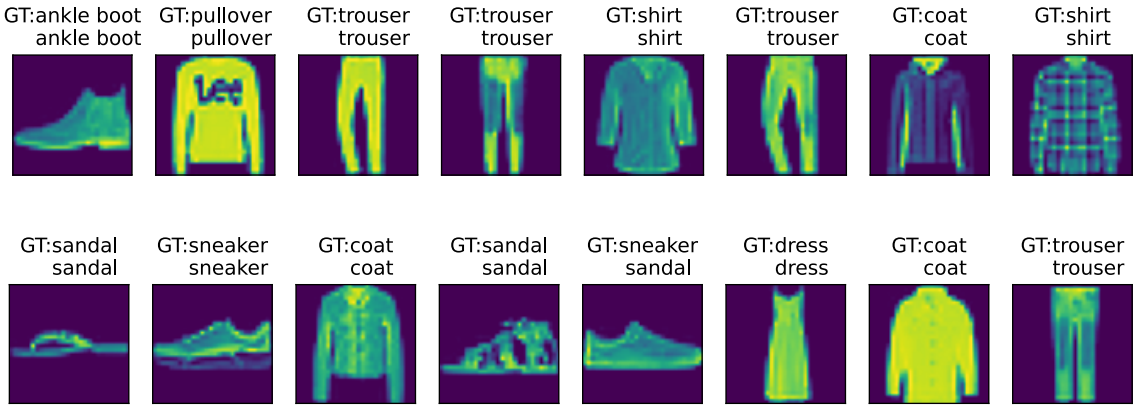

# 8. 预测

现在训练已经完成，我们的模型已经准备好**对图像进行分类预测。** 给定一系列图像，比较它们的实际标签（文本输出的第一行）和模型预测（文本输出的第二行）。

In [20]:

```
def predict_ch3(net, test_iter, n=16):  #@save
    """预测标签"""
    for X, y in test_iter:
        break
    trues = d2l.get_fashion_mnist_labels(y)
    preds = d2l.get_fashion_mnist_labels(net(X).argmax(axis=1))
    titles = ["GT:"+true +'\n     '+ pred for true, pred in zip(trues, preds)]
    d2l.show_images(
        X[0:n // 2].reshape((n // 2, 28, 28)), 1, n // 2, titles=titles[0:n // 2])
    d2l.show_images(
        X[n // 2:n].reshape((n // 2, 28, 28)), 1, n // 2, titles=titles[n // 2:n])

predict_ch3(net, test_iter)
```




## 小结

- 借助softmax回归，可以训练多分类的模型。
- 训练softmax回归循环模型与训练线性回归模型非常相似：1.先读取数据，2.再定义模型和3.损失函数，然后4.使用优化算法训练模型。大多数常见的深度学习模型都有类似的训练过程。

## 练习

1. 在本节中，我们直接实现了基于数学定义softmax运算的 `softmax` 函数。这可能会导致什么问题？提示：尝试计算$\exp(50)$的大小。
2. 本节中的函数 `cross_entropy` 是根据交叉熵损失函数的定义实现的。它可能有什么问题？提示：考虑对数的定义域。
3. 你可以想到什么解决方案来解决上述两个问题？
4. 返回概率最大的分类标签总是最优解吗？例如，医疗诊断场景下你会这样做吗？
5. 假设我们使用softmax回归来预测下一个单词，可选取的单词数目过多可能会带来哪些问题？