

解：

(1) 梯度的计算

假设输入样本 \vec{x} 属于K个类别 $Y = \{1, 2, \dots, k, \dots, K\}$ 中的某个类别k时, 在Softmax中,

我们按照式 (1) 计算其内积, 按照式 (2) 计算其属于类别j的概率:

$$s_j = \vec{w}_j^T \vec{x} \quad (1)$$

$$\hat{y}_j = \frac{e^{s_j}}{\sum_k e^{s_k}} \quad (2)$$

经过Softmax函数后, 得到的输出为K个类别的概率列向量: $\hat{Y} = (\hat{y}_1, \dots, \hat{y}_j, \dots, \hat{y}_K)^T$,

假设理想的各个类别标签对应的概率为列向量: $Y = \{y_1, \dots, y_j, \dots, y_K\}$, 且该列向量的

的一个元素为1, 其他均为0, 代表样本属于这个类别。我们选择用交叉熵作为误差

函数其表达式:

$$E_{in}(\vec{w}_k) = -\sum_{k=1}^K y_k \ln \hat{y}_k = -\ln \hat{y}_k \quad (3)$$

我们可以计算 E_{in} 对于 $\vec{w}_j (j = 1, 2, \dots, K)$ 的梯度:

$$\frac{\partial E_{in}}{\partial \vec{w}_j} = \frac{\partial E_{in}}{\partial \hat{y}_k} \frac{\partial \hat{y}_k}{\partial s_j} \frac{\partial s_j}{\partial \vec{w}_j} = -\frac{1}{\hat{y}_k} \frac{\partial \hat{y}_k}{\partial s_j} \vec{x} \quad (4)$$

我们再来计算 $\frac{\partial \hat{y}_k}{\partial s_j}$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{y}_k}{\partial s_j} &= \frac{\partial}{\partial s_j} \left(\frac{e^{s_k}}{\sum_k e^{s_k}} \right) = \frac{(e^{s_k})' \sum_k e^{s_k} - (\sum_k e^{s_k})' e^{s_k}}{(\sum_k e^{s_k})^2} = \\ &\begin{cases} \frac{e^{s_j} \sum_k e^{s_k} - e^{s_j} e^{s_k}}{(\sum_k e^{s_k})^2} = \frac{e^{s_j}}{\sum_k e^{s_k}} - \frac{e^{s_j} e^{s_k}}{\sum_k e^{s_k} \sum_k e^{s_k}} = \hat{y}_j (1 - \hat{y}_k) & j = k \\ \frac{0 \sum_k e^{s_k} - e^{s_j} e^{s_k}}{(\sum_k e^{s_k})^2} = 0 - \frac{e^{s_j} e^{s_k}}{\sum_k e^{s_k} \sum_k e^{s_k}} = -\hat{y}_k \hat{y}_j & j \neq k \end{cases} \quad (5) \end{aligned}$$

将式 (5) 代入到式 (4), 我们得到 E_{in} 对于 \vec{w}_j 的梯度:

$$\frac{\partial E_{in}}{\partial \vec{w}_j} = \frac{\partial E_{in}}{\partial \hat{y}_k} \frac{\partial \hat{y}_k}{\partial s_j} \frac{\partial s_j}{\partial \vec{w}_j} = -\frac{1}{\hat{y}_k} \frac{\partial \hat{y}_k}{\partial s_j} \vec{x} = \begin{cases} (\hat{y}_j - 1) \vec{x} & j = k \\ \hat{y}_j \vec{x} & j \neq k \end{cases} \quad (6)$$

针对N个训练样本, 将上述推导及求解过程写成矩阵或向量形式如下: