《物理与人工智能》

6. 逻辑回归、多分类与正则化

授课教师：马滟青

2025/09/29（第四周）

鸣谢：基于计算机学院《人工智能引论》课程组幻灯片

目录

- **二分类问题**
  - 逻辑回归 --- 对条件概率$p(y|x)$建模并用最大似然估计参数
- **多分类问题**
  - 扩展到多分类，可用Softmax回归
- **正则化**
  - L2正则化降低过拟合风险
  - 调整超参数，cross-validation

线性回归回顾

- 模型

  $$f(x) = w^T x + b$$

  - 输入 $x \in \mathbb{R}^d$
  - 参数 $w \in \mathbb{R}^d, b \in \mathbb{R}$，权重 (weight) 和 偏置 (bias)
  - 输出 $f(x) \in \mathbb{R}$

- 损失函数
  - 平方损失函数 (squared loss, L2 loss)
  - $J(w,b) = \frac{1}{n}\sum_{i\in[n]} L(f(x_i), y_i) = \frac{1}{n}\sum_{i\in[n]}(w^T x_i + b - y_i)^2$
  - 梯度下降训练

经验风险最小化框架

- Empirical Risk Minimization (ERM)
  - 首先确定采用的模型 $f(x)$
    - 比如，线性模型 $f(x) = w^T x + b$
  - 其次，确定损失函数 (loss function) $L(f(x), y)$
    - 比如，平方损失函数 $L(f(x), y) = (f(x) - y)^2$
  - 在训练集上最小化损失函数的平均值

    $$\min_{w,b} \frac{1}{n} \sum_{i \in [n]} L(f(x_i), y_i)$$
  - 一般都可以采用梯度下降优化参数
- 大部分监督学习算法都遵循以上经验风险最小化框架 (ERM)，区别仅在于具体选择的 $f(x)$ 和 $L(f(x), y)$

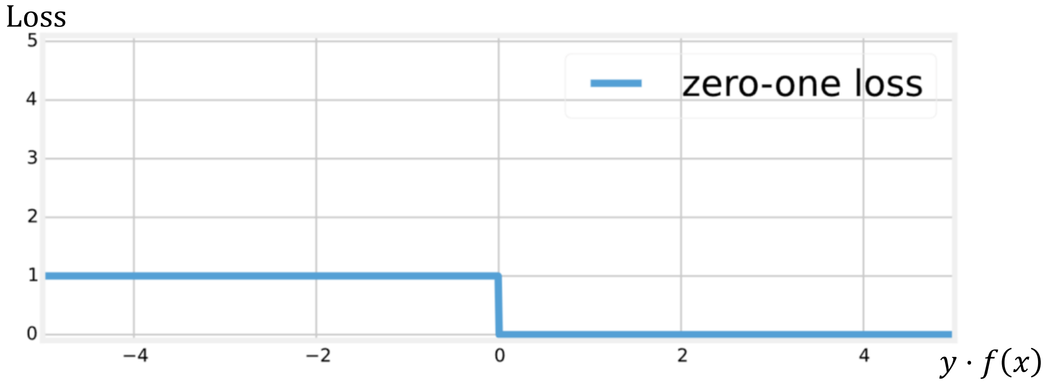
逻辑回归

- 线性回归 (Linear Regression)
  - 处理回归问题
  - 线性模型 $f(x) = w^T x + b$
  - 平方损失函数

- 逻辑回归 (Logistic Regression)
  - 处理二分类问题 （虽然名字叫回归）
  - 线性模型 $f(x) = w^T x + b$
  - 交叉熵损失函数 (cross entropy loss)

二分类 (Binary Classification)

- 标签只有两种
  - $y \in \{-1,1\}$，-1代表负类 (negative class)，1代表正类 (positive class)
  - 如垃圾邮件识别，1代表垃圾邮件，-1代表正常邮件
- 一般不直接让 $f(x) \in \mathbb{R}$ 拟合 $y \in \{-1,1\}$
- 为了将实数输出转换为类别$\{-1,1\}$，采用$sign()$函数
  - $sign(f(x)) = \begin{cases} 1, & if\ f(x) > 0 \\ -1, & if\ f(x) < 0 \end{cases}$



- 使用什么损失函数?
  - 最直接的目标，最小化分类错误数，使用零一损失函数 (zero-one loss)
  - $L(f(x),y) = \begin{cases} 0, & if\ sign(f(x)) = y \\ 1, & if\ sign(f(x)) = -y \end{cases} \Leftrightarrow L(f(x),y) = \begin{cases} 0, & if\ y \cdot f(x) \geq 0 \\ 1, & if\ y \cdot f(x) < 0 \end{cases}$ ($f(x) = 0$ 时默认0损失)
  - 但是，零一损失函数是阶跃函数，不可微 (non-differentiable) 且不连续 (non-continuous)，无法用梯度下降优化（在0处不可微，其余处梯度都为0，无法提供下降方向）

最大似然框架 (Maximum Likelihood)

北京大学 PEKING UNIVERSITY

- 让我们使用最大似然估计 (Maximum Likelihood Estimation) 来推导适合二分类问题的损失函数
- 最大似然估计 (MLE) 的原则：
  - 对观测数据进行（条件）概率建模
    - 对机器学习，每个观测数据即一个训练样本
    - 对判别式模型，我们只建模 $p(y|x;\theta)$，θ为模型参数
  - 通过最大化观测数据在给定概率模型下的似然（把训练样本预测为正确标签的概率）来估计模型参数
    - 如果训练样本互相独立（独立同分布假设），则最大似然估计可写为

      $\max_\theta \prod_{i\in[n]} p(y=y_i|x=x_i;\theta)$，或简写为 $\max_\theta \prod_{i\in[n]} p(y_i|x_i;\theta)$
    - 但是，大量概率连乘容易造成数值超出计算精度，例如$0.5^{1000} \approx 9\times 10^{-302}$
    - 解决方法为，最大化对数似然 (log-likelihood)

$$\max_\theta \log\left(\prod_{i\in[n]} p(y_i|x_i;\theta)\right) \Leftrightarrow \max_\theta \sum_{i\in[n]} \log(p(y_i|x_i;\theta))$$

最大似然估计例子

- 给定一枚正反不均匀的硬币
- 已知抛了n次硬币，其中正面朝上的次数为m次
- 用最大似然估计(MLE)估算硬币正面概率
- 解法：
  - 首先对抛硬币事件进行概率建模，假设每次抛硬币正面朝上的概率为 p，则反面为 $1-p$
  - 在这个概率模型中，p 是我们唯一要估算的参数
  - 将观测数据在给定概率模型下的似然写出（假想观测数据为“正反反正正正正反正反正正反正反正…”，其中正面m次，反面n-m次）：

$$Likelihood = p^m(1-p)^{n-m}$$

  - 最大化对数似然来估计 p

$$\max_p \; m\log p \; + (n-m)\log(1-p)$$

  - 让梯度为0，得到 $\frac{m}{p} - \frac{n-m}{1-p} = 0$，求得 $p = m/n$

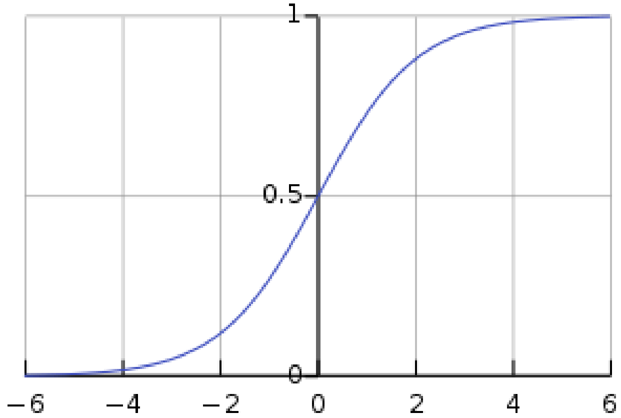
逻辑回归的最大似然估计

- 首先对 $p(y|x;\theta)$ 建模
  - 已有线性模型 $f(x)=w^Tx+b$，只需要把它转化成正类的概率
  - 采用sigmoid函数 $\sigma:(-\infty,+\infty)\rightarrow[0,1]$

$$\sigma(x)=\frac{1}{1+e^{-x}}$$

$$1-\sigma(x)=\frac{e^{-x}}{1+e^{-x}}=\frac{1}{1+e^{x}}=\sigma(-x)$$

注意：$\sigma(x)+\sigma(-x)=1$



sigmoid函数

- 则 $p(y=1|x;\theta)=p(y=1|x;w,b)=\sigma\big(f(x)\big)=\sigma(y\cdot f(x))$
- 自然的， $p(y=-1|x;w,b)=1-\sigma\big(f(x)\big)=\sigma\big(-f(x)\big)=\sigma(y\cdot f(x))$
- 说明，不论 y 取1/-1，都有 $p(y|x;w,b)=\sigma(y\cdot f(x))$!

逻辑回归的最大似然估计

北京大学 PEKING UNIVERSITY

- 在训练集上最大化对数似然
  - $\max_{w,b} \sum_{i\in[n]} \log[p(y_i|x_i;w,b)] = \max_{w,b} \sum_{i\in[n]} \log[\sigma\big(y_i \cdot f(x_i)\big)]$
  - 代入 $f(x_i) = w^T x_i + b$, 得到最优化问题

$$\max_{w,b} \sum_{i\in[n]} \log[\sigma(y_i(w^T x_i + b))] = \max_{w,b} \sum_{i\in[n]} \log[\frac{1}{1+e^{-y_i(w^T x_i+b)}}]$$

$$= \max_{w,b} (-\sum_{i\in[n]} \log[1 + e^{-y_i(w^T x_i+b)}])$$

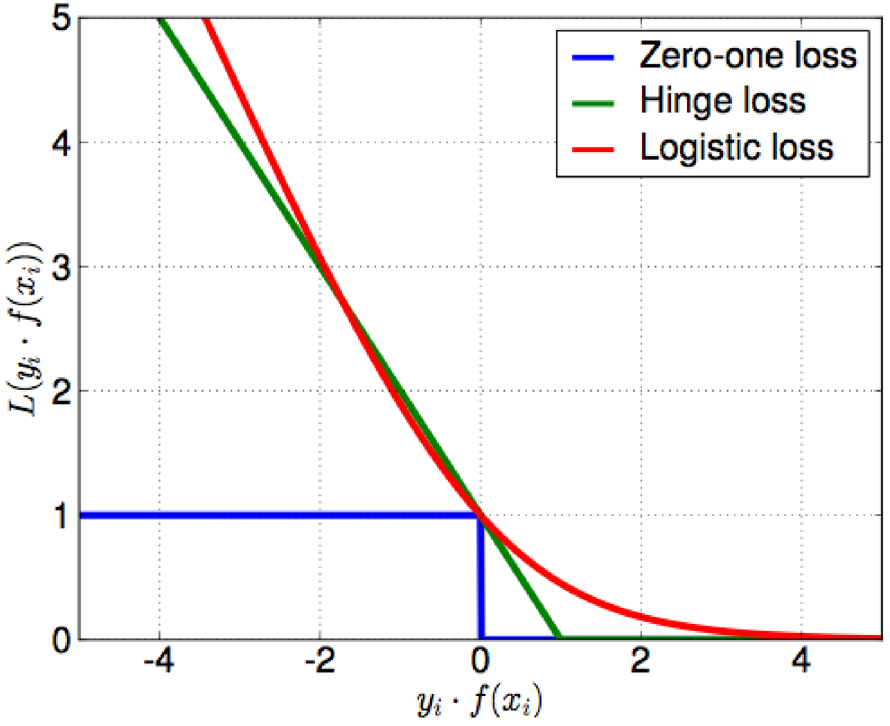
  - 写成最小化平均损失函数的形式（逻辑回归的ERM形式）：

$$\min_{w,b} \frac{1}{n} \sum_{i\in[n]} \log[1 + e^{-y_i(w^T x_i+b)}]$$

  - 由最大对数似然推出的损失函数 $L(f(x_i), y_i) = \log[1 + e^{-y_i(w^T x_i+b)}]$ 称为交叉熵损失 (Cross Entropy Loss)，有时也直接称为 Logistic/Log Loss

替代损失函数视角

- 除了从最大似然估计视角推导逻辑回归，我们也可以从替代损失函数(substitute loss) 的视角看待逻辑回归



Logistic loss: $L(f(x_i), y_i) = \log[1 + e^{-y_i f(x_i)}]$

- 逻辑回归的交叉熵损失函数（红线）是零一损失的上界 (upper bound)
- 交叉熵损失函数可微、连续、且是凸函数 (convex)，因此容易优化
- 最小化上界同样可以最小化零一损失函数，即分类错误数
- 因此称为替代损失函数
- 绿线为合页损失函数 (Hinge Loss)， $L(f(x_i), y_i) = \max(0, 1 - y_i f(x_i))$，另一种常见的替代损失函数

逻辑回归的训练

- 使用梯度下降求解如下最优化问题

$$\min_{w,b}\frac{1}{n}\sum\nolimits_{i\in[n]}\log[1+e^{-y_i(w^Tx_i+b)}]$$

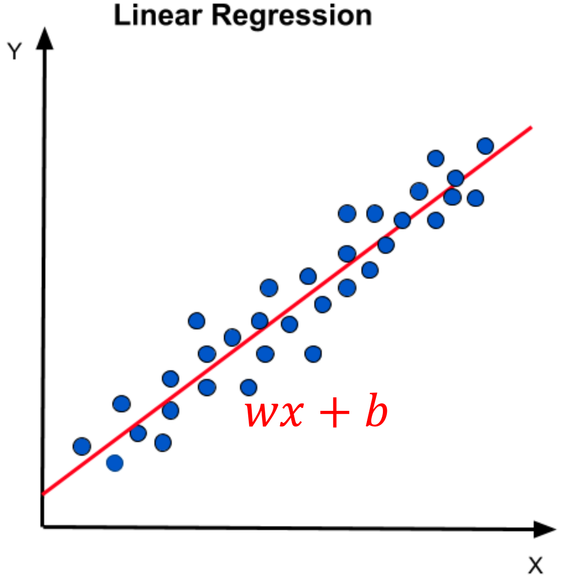
- 对目标 $J(w,b)=\frac{1}{n}\sum_{i\in[n]}\log[1+e^{-y_i(w^Tx_i+b)}]$ 求梯度
  - $\frac{\partial J(w,b)}{\partial w}=-\frac{1}{n}\sum_{i\in[n]}\frac{e^{-y_i\left(w^Tx_i+b\right)}}{1+e^{-y_i(w^Tx_i+b)}}y_ix_i=-\frac{1}{n}\sum_{i\in[n]}[1-p(y_i|x_i;w,b)]y_ix_i$
  - $\frac{\partial J(w,b)}{\partial b}=-\frac{1}{n}\sum_{i\in[n]}\frac{e^{-y_i\left(w^Tx_i+b\right)}}{1+e^{-y_i(w^Tx_i+b)}}y_i=-\frac{1}{n}\sum_{i\in[n]}[1-p(y_i|x_i;w,b)]y_i$
  - 把样本 i 预测为其真实标签的概率越接近1（说明已经充分拟合该样本），它对梯度的贡献越小
- 迭代更新 w,b 直到 $J(w,b)$ 无法再下降或达到预设的最大次数

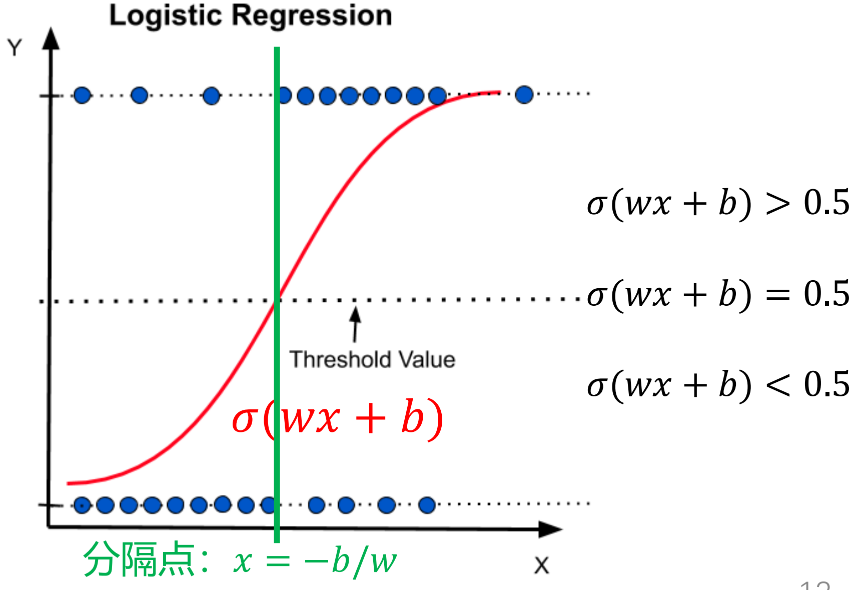
$$w\leftarrow w-\alpha\cdot\frac{\partial J(w,b)}{\partial w},\quad b\leftarrow b-\alpha\cdot\frac{\partial J(w,b)}{\partial b}$$

线性回归 vs 逻辑回归

	线性回归	逻辑回归
任务	回归	二分类
模型	线性模型 $f(x) = w^T x + b$	线性模型 $f(x) = w^T x + b$
输出	$f(x)$	$sign(f(x))$ 直接输出{-1, 1}; 或 $\sigma(f(x))$ 输出取1的概率
损失函数	平方损失 $(f(x_i) - y_i)^2$	交叉熵损失 $\log[1 + e^{-y_i(w^T x_i + b)}]$

一维可视化

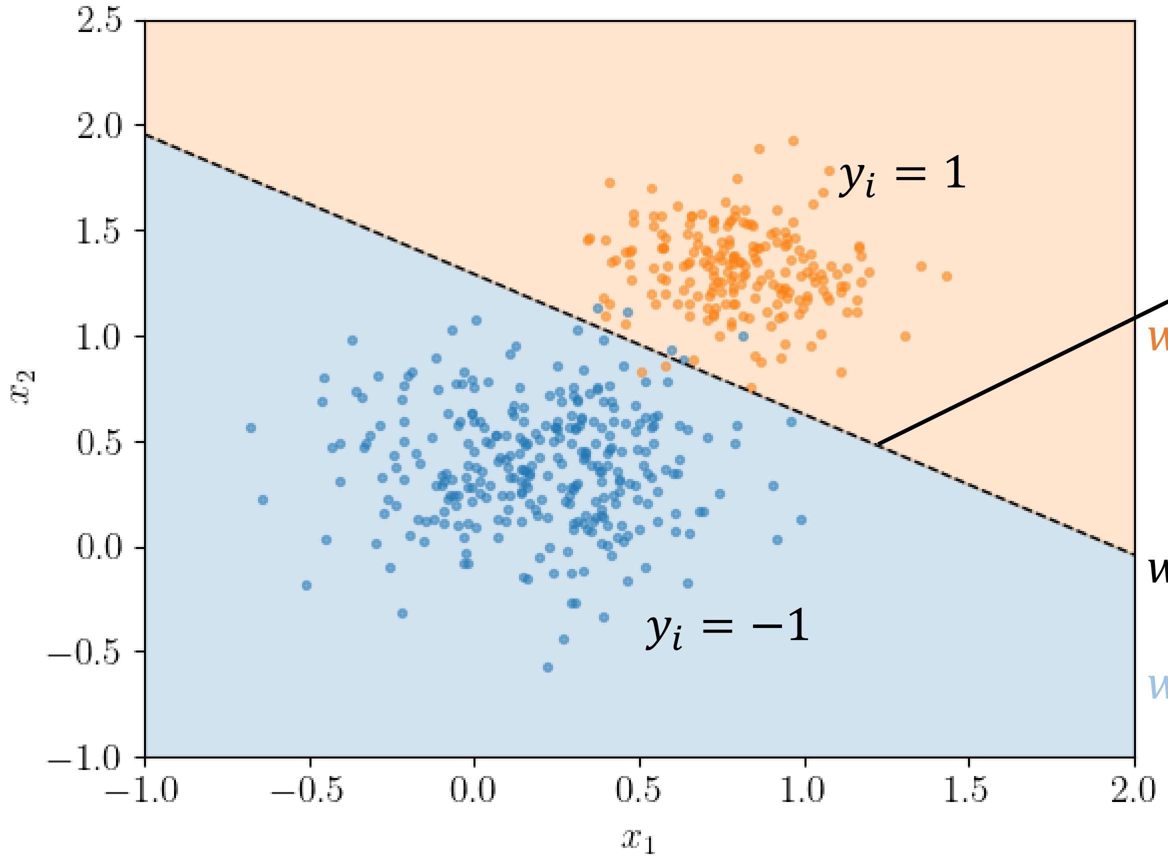




Images from Internet

线性回归 vs 逻辑回归

逻辑回归的高维可视化

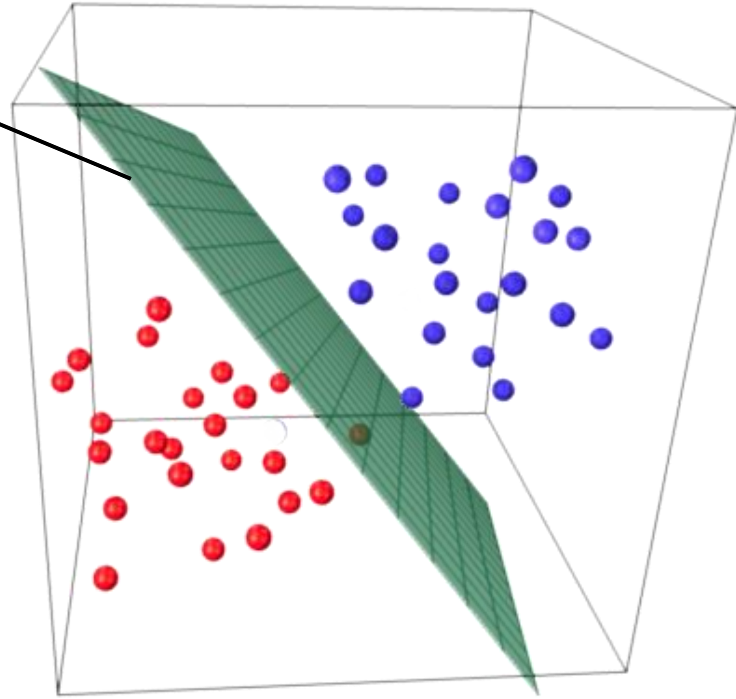


$w^T x + b > 0$

$w^T x + b = 0$

$w^T x + b < 0$

分隔超平面
separating hyperplane



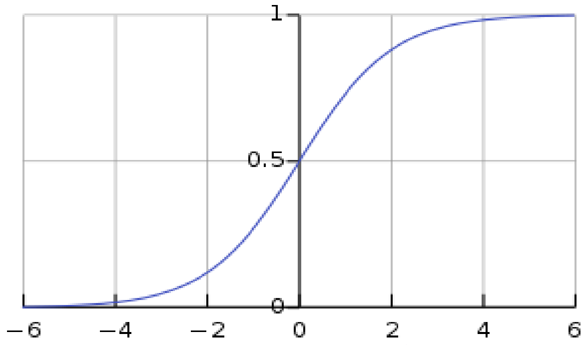
Images from Internet

逻辑回归总结

- 模型

$$f(x) = w^T x + b$$

  - 输入 $x \in \mathbb{R}^d$，参数 $w \in \mathbb{R}^d, b \in \mathbb{R}$
  - $\sigma(f(x)) = \frac{1}{1+e^{-f(x)}}$ 将实值 $f(x)$ 转换为取正类 $(y = 1)$ 的概率，
  - $1 - \sigma(f(x))$ 转换为取负类 $(y = -1)$ 的概率

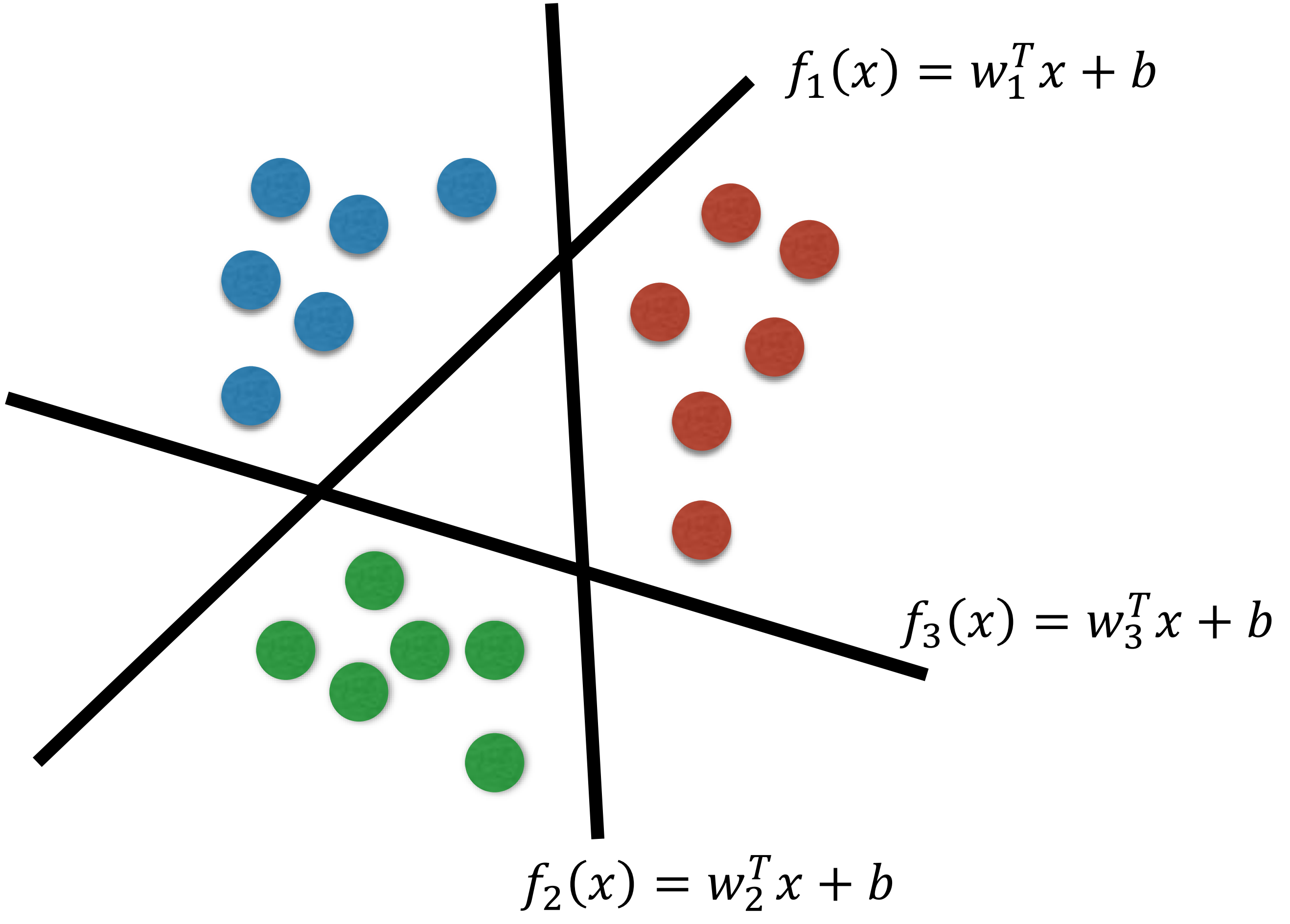


sigmoid函数

- 最大似然估计
  - $\max_{w,b} \sum_{i\in[n]} \log[p(y_i|x_i; w, b)] = \sum_{i\in[n]} \log[\sigma(y_i \cdot f(x_i))]$
- 等价于最小化交叉熵损失
  - $\min_{w,b} \frac{1}{n} \sum_{i\in[n]} \log[1 + e^{-y_i(w^T x_i + b)}]$

多分类问题 (Multiclass Classification)

- 如何处理类别数 K>2 的情况?
  - one vs rest
    - 对K分类问题训练K个二分类器（如逻辑回归）
    - 第k个二分类器将第k类当成正类，其余所有类别都当成负类
    - $y = argmax_{k \in [K]} f_k(x)$
  - 问题:
    - 当类别数 K 非常大时，分别训练K个二分类器代价太高
    - K个二分类器互相独立，无法统一成一个模型



Softmax 回归

- 专门解决多分类问题（虽然仍然叫回归）
- K 分类问题： $y \in \{1,2,\dots,K\} = [K], x \in \mathbb{R}^d$
- 共同训练 K 个模型 $f_k(x) \in \mathbb{R}, k \in [K]$
- 将模型输出 $f_k(x)$ 转化为取第 k 类的概率
  - 不能使用 sigmoid 函数，因为需满足 $\sum_{k\in[K]} p(y=k|x) = 1$
  - 解决方法：使用 softmax 函数，使概率归一化

$$p(y=k|x) = \frac{e^{f_k(x)}}{\sum_{j\in[K]} e^{f_j(x)}}$$

  - e 指数的放大效应会使得如果 $f_k(x) \gg f_j(x), \forall j \neq k$，则 $p(y=k|x) \approx 1$

Softmax 回归

k	1	2	3	4
$f_k(x)$	2.0	1.0	1.0	0.5
$\frac{e^{f_k(x)}}{\sum_{j\in[K]} e^{f_j(x)}}$	0.5105	0.1878	0.1878	0.1139

k	1	2	3	4
$f_k(x)$	3.0	1.0	0.5	0.5
$\frac{e^{f_k(x)}}{\sum_{j\in[K]} e^{f_j(x)}}$	0.7695	0.1041	0.0632	0.0632

k	1	2	3	4
$f_k(x)$	10.0	1.0	1.0	1.0
$\frac{e^{f_k(x)}}{\sum_{j\in[K]} e^{f_j(x)}}$	0.9996	0.0001	0.0001	0.0001

Softmax 回归

- 预测 y 取第 k 类概率： $p(y=k|x)=\frac{e^{f_k(x)}}{\sum_{j\in[K]} e^{f_j(x)}}$
- 满足归一化条件： $\sum_{k\in[K]} p(y=k|x)=1$
- 使用最大对数似然估计参数
  - 假设 $f_k(x)$ 的参数为 θ_k，最大化训练集 $\{(x_i,y_i)|i\in[n]\}$ 的对数似然：

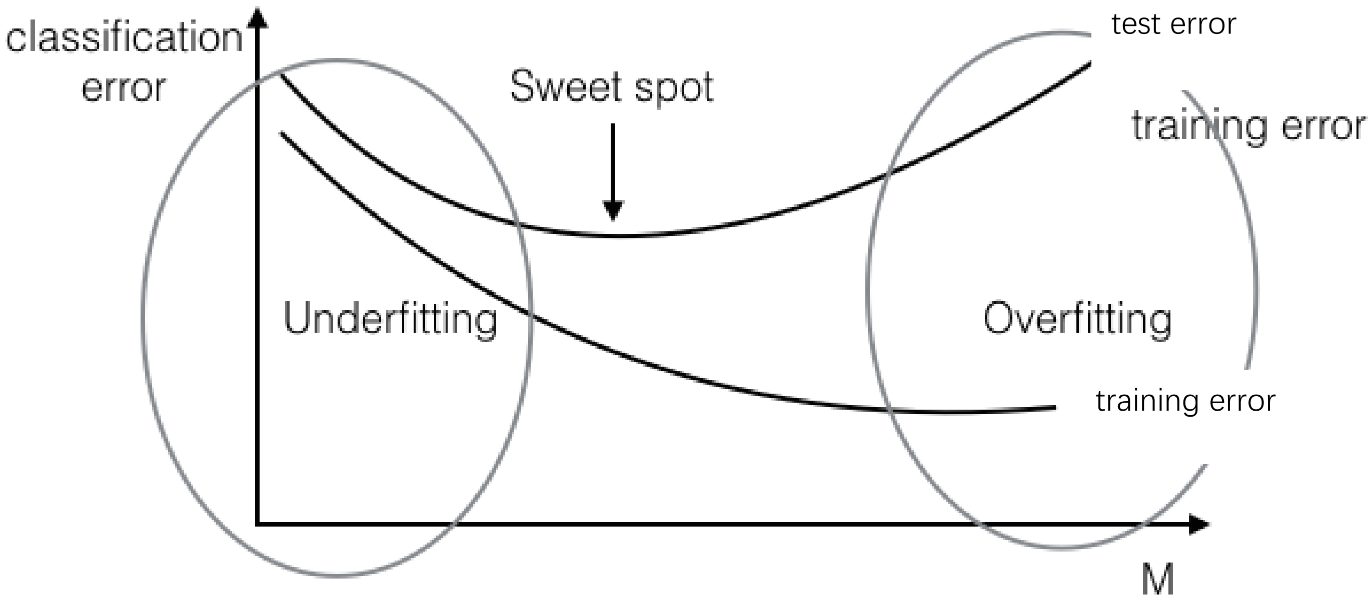
$$\max_{\{\theta_k\}}\{\sum_{i\in[n]}\log[p(y_i|x_i)]=\sum_{i\in[n]}\log\left[\frac{e^{f_{y_i}(x_i)}}{\sum_{j\in[K]} e^{f_j(x_i)}}\right]\}$$

  - 等价于最小化交叉熵损失：

$$\min_{\{\theta_k\}}\{-\frac{1}{n}\sum_{i\in[n]}\log\left[\frac{e^{f_{y_i}(x_i)}}{\sum_{j\in[K]} e^{f_j(x_i)}}\right]=\frac{1}{n}\sum_{i\in[n]}(\log[\sum_{j\in[K]} e^{f_j(x_i)}]-f_{y_i}(x_i))\}$$

过拟合现象回顾

- 过拟合 (overfitting): 测试误差远远大于训练误差
  - 错把训练样本中找到的特殊规律当做了普遍规律——应避免这种现象



正则化 (Regularization)

- 实际中我们一般在损失函数后加一项一起优化:

  $$\min_{f} \frac{1}{n} \sum_{i \in [n]} L(f(x_i), y_i) + \lambda \cdot R(f)$$

  - $\lambda \cdot R(f)$ 称为正则化项 (regularization term)，用于惩罚过于复杂的模型
  - $\lambda > 0$ 是个超参数 (hyperparameter)，预先指定，不随参数优化
- 为什么需要正则化?
  - 防止过拟合 (overfitting)，即测试误差远远高于训练误差
  - 常见过拟合原因:
    - 某几个特征维度 j 支配 (dominate) 了预测，即这些维度的权重 w_j 过大
    - 输入数据中存在大量没用的特征维度，但仍然赋予了它们非零的权重

正则化 (Regularization)

- 常见过拟合原因：
  - 某几个特征维度 j 支配 (dominate) 了预测，即这些维度的权重 w_j 过大
    - 解决方法：L2 正则化 $R(f) = \|w\|_2^2 = w^T w = \sum_{j\in[d]} w_j^2$，简写为 $\|w\|^2$
    - 作用： w_j^2 会放大较大的权重，用于惩罚少数过大的权重维度，使权重分配更平均
  - 输入数据中存在大量没用的特征维度，但仍然赋予了它们非零的权重
    - 解决方法：L1 正则化 $R(f) = \|w\|_1 = \sum_{j\in[d]} |w_j|$
    - 作用：鼓励稀疏的 w，即 w 中大部分维度为零，仅有少数维度非零 （具体原因超出本课程范围）

带正则化的回归

- 岭回归 (Ridge Regression)
  - 线性回归 + L2 正则化

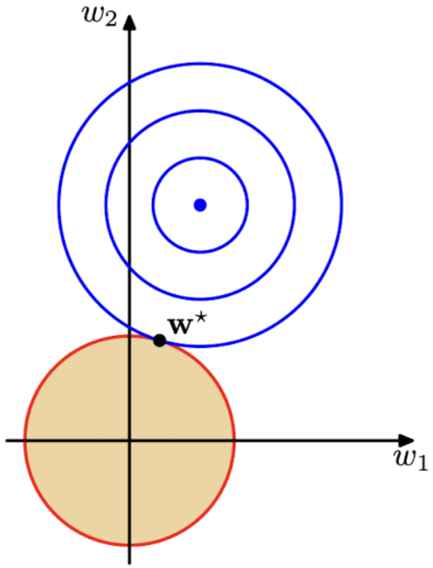
$$\min_{w,b} \frac{1}{n} \sum_{i\in[n]} (w^T x_i + b - y_i)^2 + \lambda \|w\|^2$$

  - 梯度

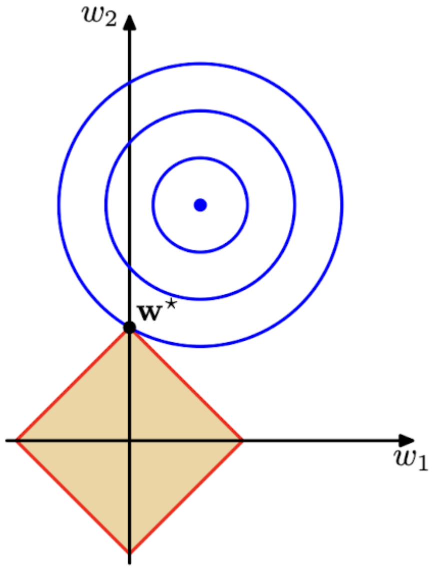
$$\frac{\partial J(w,b)}{\partial w} = \frac{2}{n} \sum_{i\in[n]} (w^T x_i + b - y_i)\, x_i + 2\lambda w \in \mathbb{R}^d$$

- Lasso 回归
  - 线性回归 + L1 正则化

$$\min_{w,b} \frac{1}{n} \sum_{i\in[n]} (w^T x_i + b - y_i)^2 + \lambda \|w\|_1$$



Ridge regression



Lasso regression

带正则化的分类

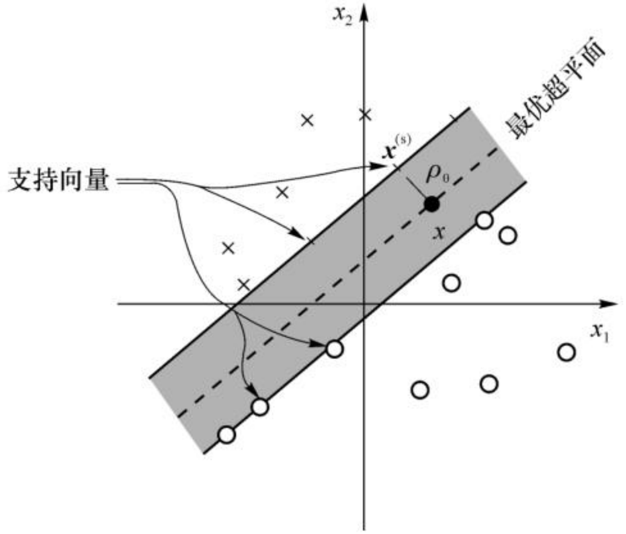
北京大学 PEKING UNIVERSITY

- 逻辑回归 (完整形式)
  - 交叉熵损失 + L2 正则化

$$\min_{w,b} \frac{1}{n} \sum_{i\in[n]} \log[1 + e^{-y_i(w^T x_i + b)}] + \lambda \|w\|^2$$

  - 梯度

$$\frac{\partial J(w,b)}{\partial w} = -\frac{1}{n} \sum_{i\in[n]} [1 - p(y_i|x_i; w, b)] y_i x_i + 2\lambda w \in \mathbb{R}^d$$



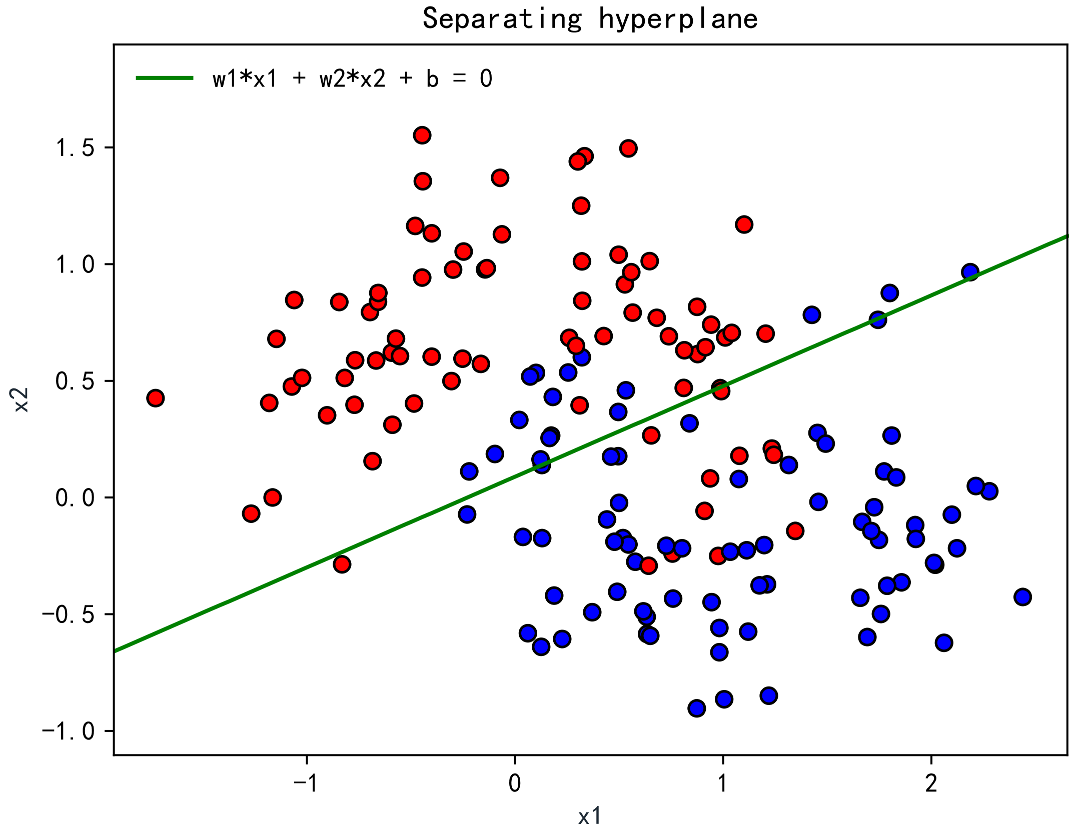
- 支持向量机 (Support Vector Machine, SVM)　(最大间隔准则)
  - 合页损失 (Hinge Loss) + L2 正则化

$$\min_{w,b} \frac{1}{n} \sum_{i\in[n]} \max(0, 1 - y_i(w^T x_i + b)) + \lambda \|w\|^2$$

逻辑回归例子

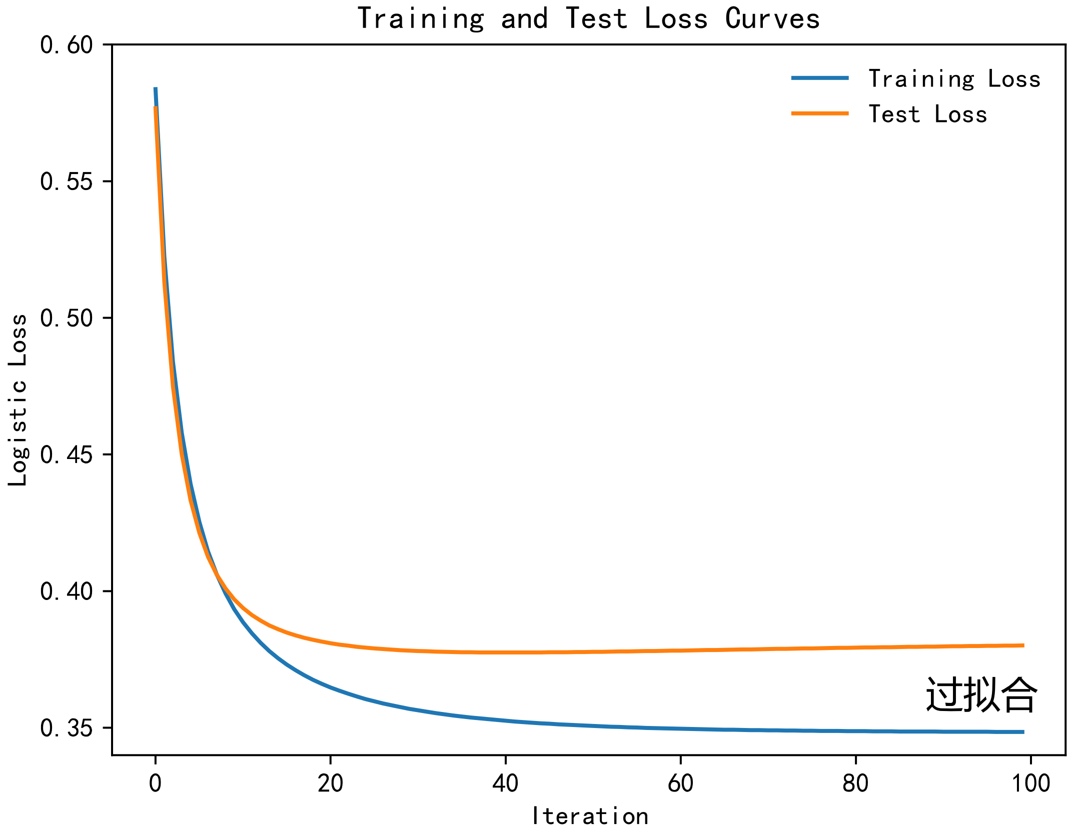
- 不使用L2正则化

分隔超平面



$$w_1 = 1.300, w_2 = -3.344$$

训练/测试损失曲线

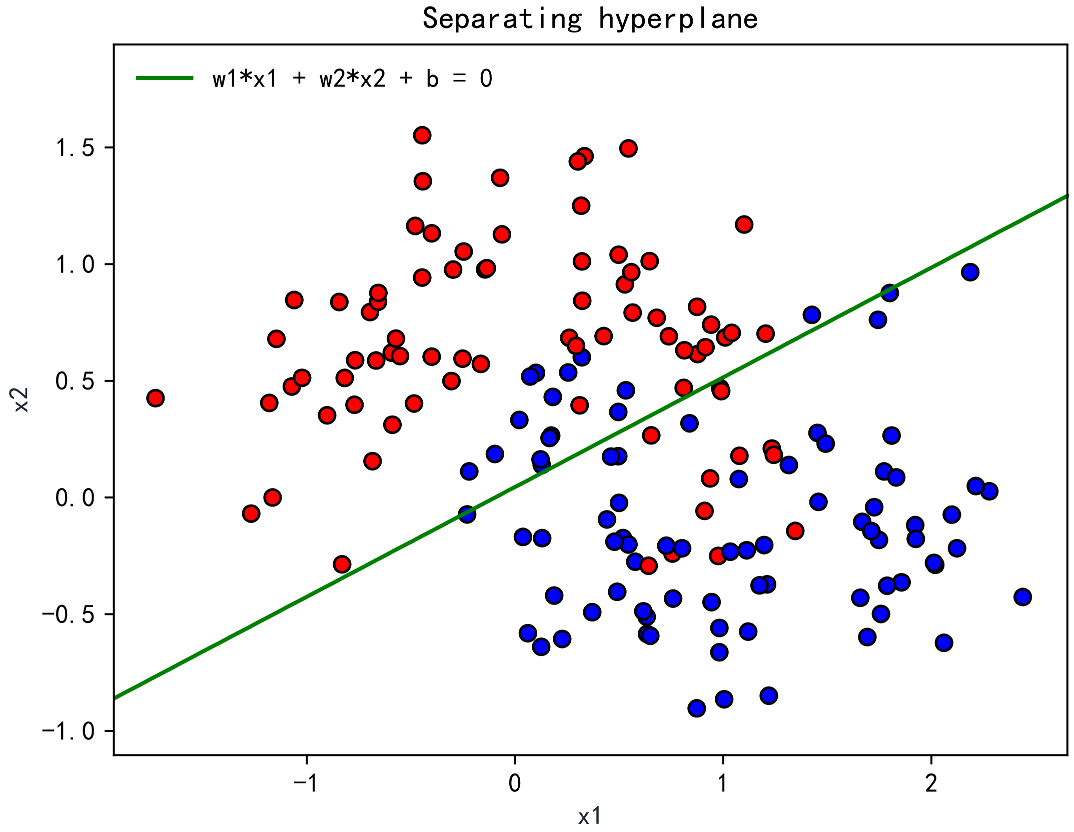


$$Training\ Loss = 0.348$$
$$Test\ Loss = 0.380$$

逻辑回归例子

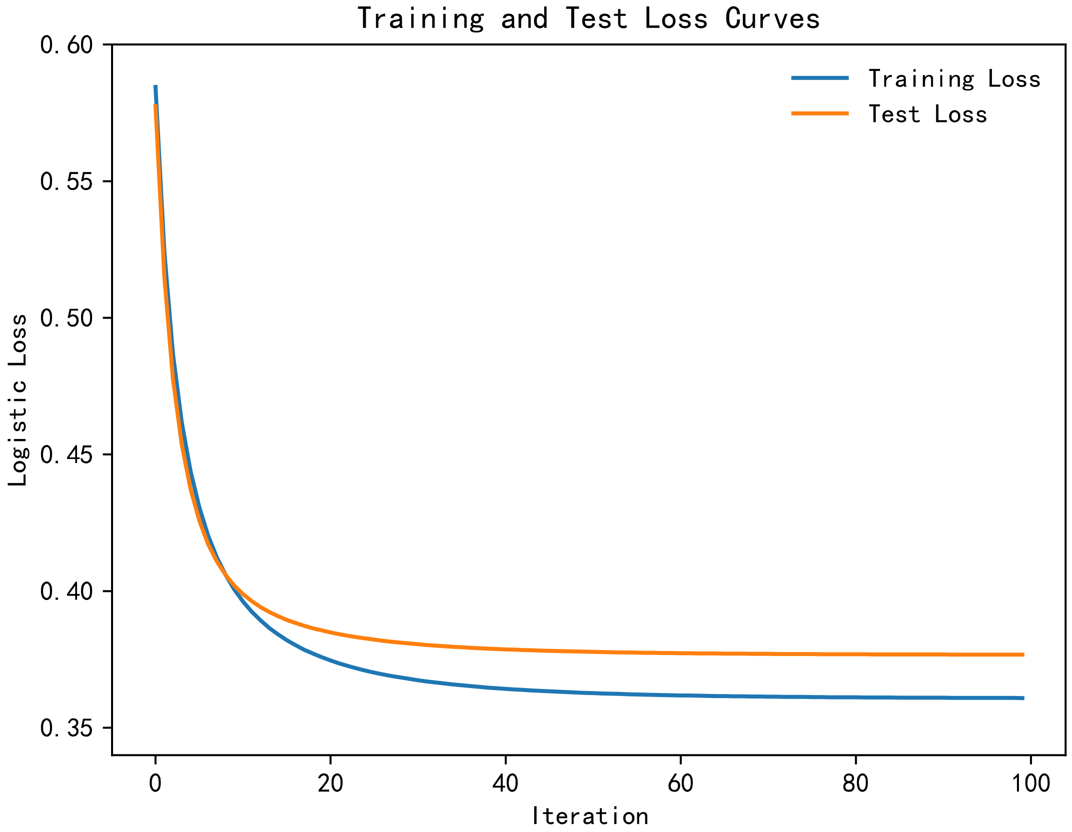
- L2正则化 $\lambda = 0.01$

分隔超平面



$$w_1 = 1.132, w_2 = -2.407$$

训练/测试损失曲线



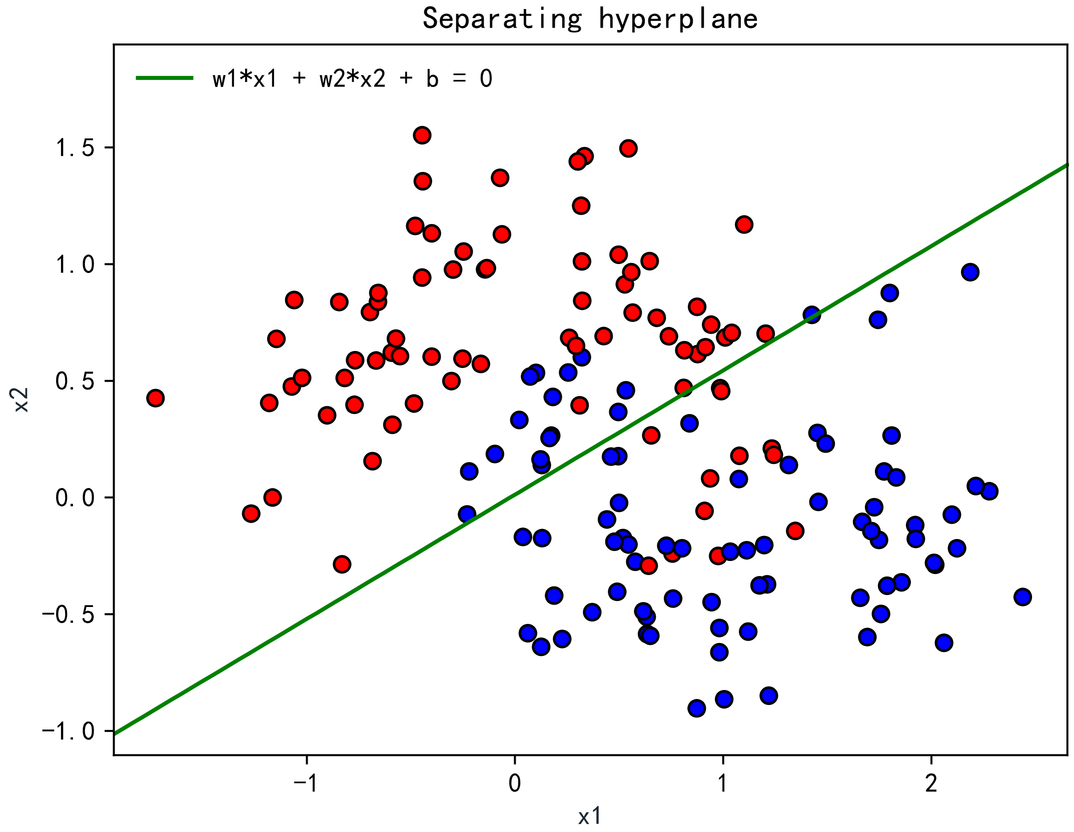
较好

$$Training\ Loss = 0.361$$
$$Test\ Loss = 0.377$$

逻辑回归例子

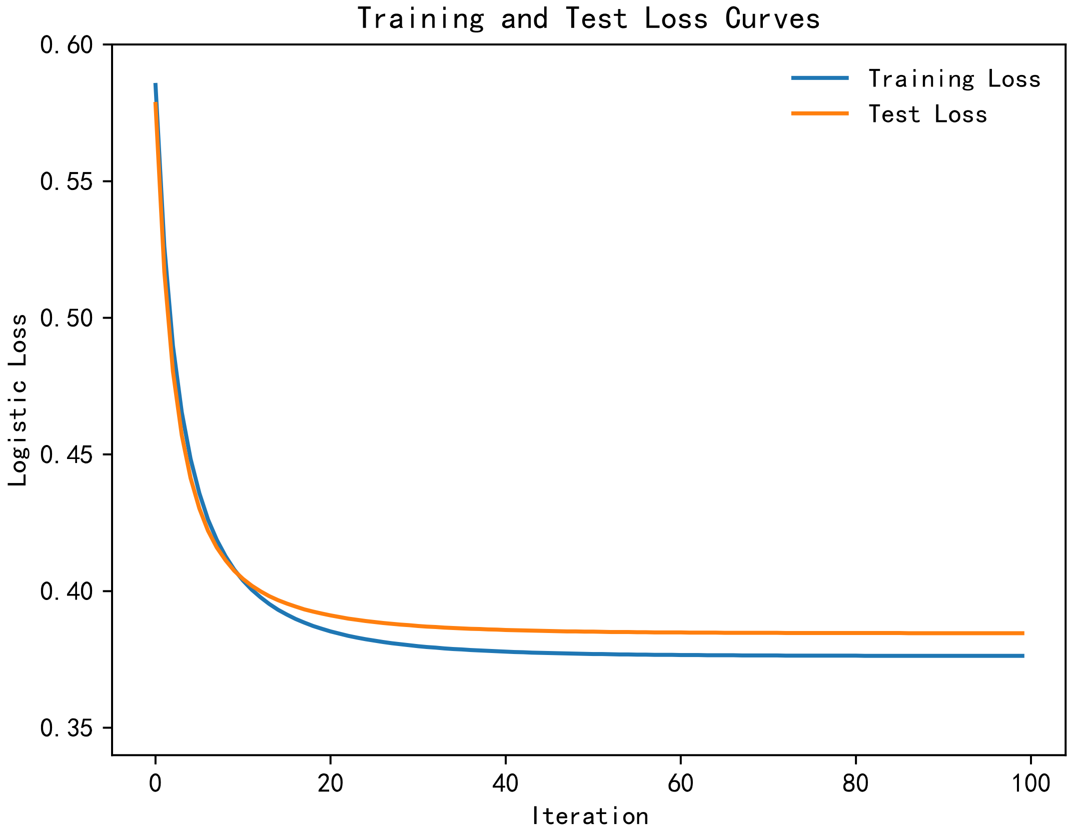
- L2正则化 $\lambda = 0.02$

分隔超平面



$$w_1 = 1.044, w_2 = -1.960$$

训练/测试损失曲线



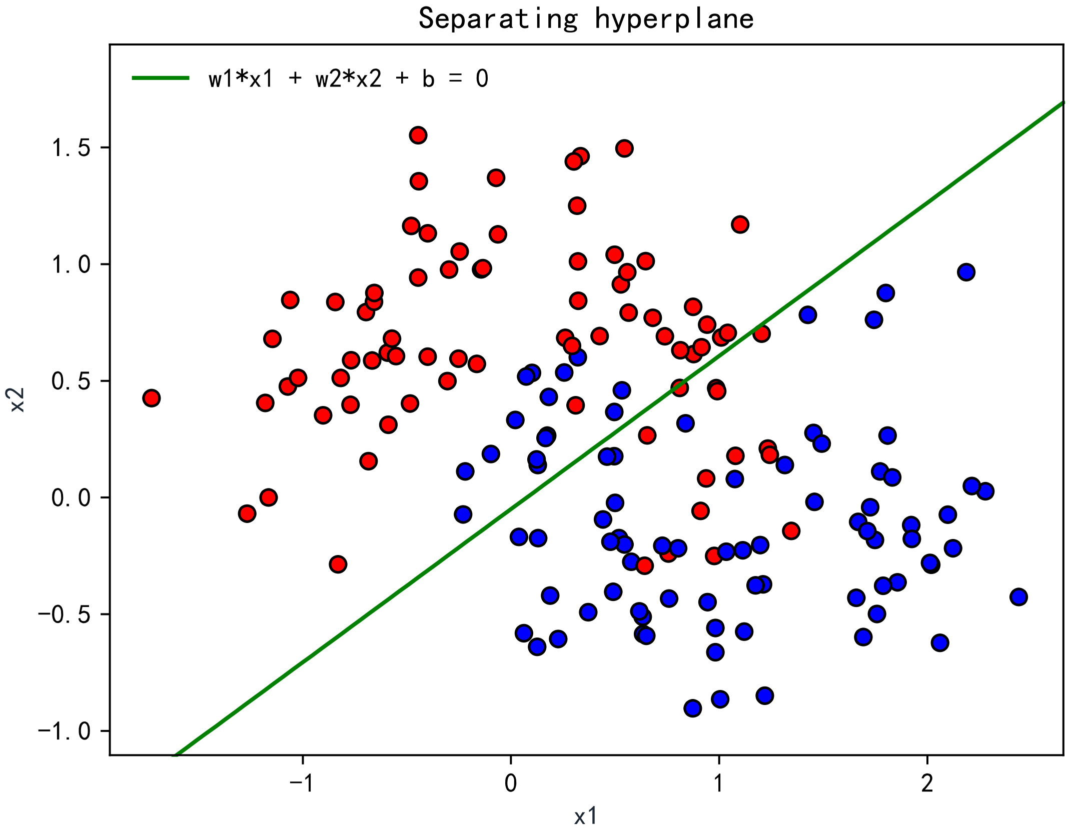
较好

$$Training\ Loss = 0.376$$
$$Test\ Loss = 0.385$$

逻辑回归例子

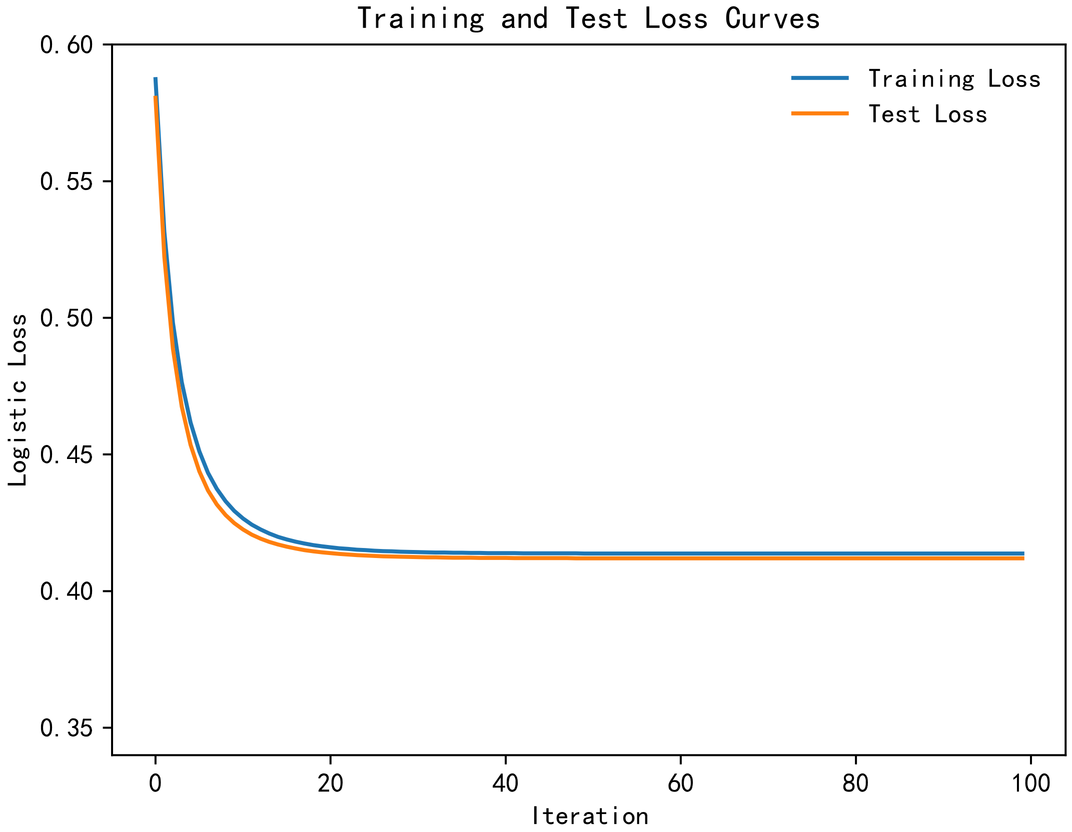
- L2正则化 $\lambda = 0.05$

分隔超平面



$w_1 = 0.882, w_2 = -1.344$

训练/测试损失曲线



欠拟合

$$Training\ Loss = 0.414$$
$$Test\ Loss = 0.412$$

超参数与模型选择

- 训练过程中一般涉及一些超参数 (hyperparameters)
  - 梯度下降的学习率 (learning rate) α，正则化项的系数 λ 等
  - 此外，使用哪种模型、哪种损失函数、哪种正则化等也可看作超参数
  - 找到所有可能的超参数组合，例如 $\alpha \in \{0.1, 0.01, 0.001\}, \lambda \in \{10, 1, 0.1\}, \mathrm{Loss} \in \{Hinge, Cross\ Entropy\}$，则其中一组超参数组合为 $\{\alpha{:}\ 0.01, \lambda{:}\ 0.1, \mathrm{Loss}{:}\ Hinge\}$
- 使用验证集 (validation set) 来选择最优超参数
  - 在训练集、测试集之外引入验证集，通常按照训练集/验证集/测试集分别80%/10%/10%的比例划分
  - 对每一组超参数的组合，在训练集上训练参数，在验证集上验证模型误差
  - 遍历所有可能的超参数组合，选择在验证集上误差最小的模型和超参数
  - 使用选定的模型和超参数在测试集上最终测试模型误差，估计模型泛化能力

K-折交叉验证 (K-fold Cross-Validation)

- 有时总数据量比较少，10%的验证集不足以准确地验证模型性能
- K-折交叉验证：
  - 将测试集外的所有数据随机分为 K 份
  - 对一组给定的超参数组合：
    - 每次使用 K-1 份数据训练模型，用 1 份验证模型误差
    - 将 K 次验证的模型误差取平均来衡量该组超参数的好坏
    - 遍历所有可能的超参数组合
  - 返回平均误差最低的超参数组合，在测试集上最终测试模型性能

谢谢

北京大學
PEKING UNIVERSITY